

**Ortsaufgelöste Messung
der Gitterverspannungen in Halbleitern
mittels Dunkelfeld off-axis Elektronenholographie**

Dissertation

zur Erlangung des akademischen Grades

**Doktor rerum naturalium
(Dr. rer. nat.)**

vorgelegt

**der Fakultät Mathematik und Naturwissenschaften
der Technischen Universität Dresden**

von

Dipl.-Phys. Jan Sickmann

geboren am 5. Dezember 1982 in Beckum

- 1. Gutachter:** Prof. Dr. rer. nat. Hannes Lichte, Technische Universität Dresden
2. Gutachter: Prof. Christoph T. Koch, PhD, Universität Ulm

Tag des Einreichens der Arbeit: 6. August 2014
Tag der mündlichen Prüfung: 18. Dezember 2014

Kurzfassung

Die Dunkelfeld off-axis Elektronenholographie (DFH) im Transmissionselektronenmikroskop ist eine nanoskalige Interferometriemethode, die es erlaubt, eine ausgewählte Beugungswelle eines Kristalls aufzuzeichnen und anschließend als zweidimensionale Amplituden- und Phasenverteilung zu rekonstruieren. Da sich aus dem Gradientenfeld der Phasenverteilung geometrische Verzerrungen des Kristallgitters bestimmen lassen, ermöglicht die DFH, Deformationsfelder in Kristallen zu vermessen. Damit eröffnen sich der Halbleiterindustrie vielversprechende Analysemöglichkeiten von lokalen mechanischen Verspannungen in Halbleiterkristallen insbesondere im Kanalbereich von Transistoren. Dabei verspricht die DFH eine höhere Ortsauflösung als rasternde, auf Elektronenbeugung mit möglichst fein fokussierten Elektronensonden basierende Methoden wie Nanobeugung. Jedoch steht die DFH als Analysemethode für mechanische Verspannungen bisher noch nicht standardmäßig zur Verfügung. Forschungs- und Entwicklungsbedarf besteht insbesondere hinsichtlich der Anpassung der Methodik auf kompliziertere Halbleiterstrukturen.

Am Beispiel des Elementargitters wird demonstriert, wie einerseits die Gitterverzerrung die Phase der Beugungswelle moduliert, und wie andererseits aus dem Gradient der Phase diese Deformation wieder rekonstruiert werden kann. Zusätzlich wird die Modulation der Beugungswelle mit Hilfe eines erst kürzlich veröffentlichten analytischen Modells für den Zweistrahlfall erläutert. Spezielle Anpassungen der DFH im TEM erlauben, die geometrische Phase entweder mit 3...5 nm Lateralaufklärung bei 200 nm breitem Gesichtsfeld oder mit 8...10 nm Lateralaufklärung bei 800 nm breitem Gesichtsfeld aufzuzeichnen. Da die Deformationskarte durch numerische Ableitung der geometrischen Phase bestimmt wird, hängt die Signalaufklärung der Deformationsmessung direkt von der Signalqualität in der rekonstruierten geometrischen Phase ab. Da die Ableitung das Rauschen verstärkt, werden verschiedene Strategien zur Rauschminderung und Signalverbesserung untersucht, u.a. werden Methoden zur Rauschfilterung eines DF-Hologramms oder zur Glättung der Deformationskarte vorgestellt. Durch Rekonstruktion einer gemittelten geometrischen Phase aus einer Dunkelfeldhologrammserie lassen sich Deformationen mit einer Messabweichung von lediglich $\Delta\epsilon = 0,05\%$ bestimmen. Bei Aufzeichnung und Rekonstruktion der geometrischen Phase treten eine Reihe von Artefakten auf, die durch Fresnelsche Beugungssäume, defekte Detektorpixel sowie Verzeichnungen durch Projektivlinsen und Detektoroptik hervorgerufen werden. Da sie die Bestimmung der Deformationskarte erschweren, werden geeignete Methoden zur Vermeidung oder Korrektur vorgestellt. Die Präparation von TEM-Lamellen mit fokussiertem Ionenstrahl (FIB) verursacht Schädigungen der Probenoberfläche. Durch Vergleiche von DFH-Messungen mit Finite-Elemente-Simulationen wird gezeigt, dass die auf Oberflächenrelaxation zurückzuführenden Abweichungen vom simulierten Deformationszustand bei 120...160 nm Lamellendicke bis zu 10 % betragen können. Präparationsbedingte lokale Dickenvariationen (Curtaining) können zu ähnlich großen Abweichungen führen.

Anwendbarkeit und Funktionalität der DFH werden an modernen Halbleiterstrukturen untersucht. Die Vermessung einer verspannten SiGe-Schicht auf Si-Substrat zeigt eine sehr gute Übereinstimmung mit einem analytischen Modell. Die Abweichung beträgt ca. 10 % und kann durch Oberflächenrelaxation an der SiGe/Si-Grenzfläche erklärt werden. Mittels SiGe an Source und Drain verspannte Transistoren dienen als Testobjekte für einen Vergleich von DFH und Nanobeugung. Beide Methoden liefern identische Ergebnisse. Der Vorteil der DFH besteht jedoch darin, das Deformationsfeld vollständig in Form einer zweidimensionalen Karte abzubilden, anstatt wie die Nanobeugung lediglich einzelne Profilschnitte zu messen. Die Deformationsmessung an SOI-Strukturen wird durch die leicht unterschiedliche Kristallorientierung (Miscut) zwischen SOI und Si-Substrat, das als

Referenzbereich dient, erschwert. Die Deformationswerte im SOI zeigen ein Offset von $\Delta\varepsilon = 0,2\%$ gegenüber dem Si-Substrat. Der Mismatch zwischen SOI und Si-Substrat kann zu $0,3^\circ$ bestimmt werden. Für Transistoren mit tensiler Deckschicht gelingt es, Dehnungen von $\varepsilon = +0,3\%$ in perfekter Übereinstimmung mit FE-Simulationen zu messen. Bei Transistoren, bei denen gleichzeitig eine kompressive Deckschicht und SiGe an Source und Drain eingesetzt werden, gelingt es mittels DFH, Stauchungen von $\varepsilon = -(0,1 \pm 0,05)\%$ im Transistorkanal 5 nm unterhalb des Gateoxids nachzuweisen.

Abstract

Dark-field off-axis electron holography (DFH) in a transmission electron microscope is based on the interference of a diffracted wave emanating from adjacent strained and unstrained sample areas to form a dark-field hologram, from which the phase of the diffracted wave can be reconstructed. Since the gradient of the phase parallel to the diffraction vector yields the lattice strain in this direction, a two-dimensional strain map can be derived. Therefore, DFH is considered to be a promising technique for strain metrology by semiconductor industry, especially for local strain measurements in the transistor channel. In particular, DFH offers better lateral resolution than scanning TEM-techniques based on electron diffraction with small focused electron probe like nano-beam diffraction. However, DFH is not yet available as a standard technique for strain metrology. Research is still needed to apply the method to complex devices.

Using the example of a strained cosine lattice the phase modulation due to lattice distortions is discussed. In addition, modulation of the diffracted wave is approximated in two-beam diffraction condition. Adjustments of DFH in the TEM provide strain measurements with 3...5 nm lateral resolution at 200 nm field of view or 8...10 nm lateral resolution at 800 nm field of view. During recording and reconstruction of dark-field holograms several artifacts appear, for instance Fresnel diffraction, defective detector pixels, distortions of projective lenses or detector optics. Since they limit strain evaluation, suitable methods to either avoid or correct these artifacts are discussed. Sample preparation with focused ion beam (FIB) causes surface damage. Comparing DFH results with finite-element simulations reveals a deviation of 10 % between simulation and experiment at 120...160 nm sample thickness due to surface relaxation. FIB-induced thickness variations (curtaining) lead to comparable deviations.

Applicability of DFH for strain metrology is analyzed on several modern device structures. Strain measurements of SiGe-layers on Si-substrate correspond quite well with an analytic model. A residual deviation of 10 % can be explained by surface relaxation close to the SiGe/Si-interface. Transistors strained by SiGe-source/drain serve as test objects for a comparison of DFH with nano-beam diffraction. Though both techniques reveal identical results, DFH is able to map the complete two-dimensional strain field, whereas nano-beam diffraction can only provide single line-scans. Strain mapping in silicon-on-insulator (SOI) is limited by the different crystal orientation (miscut) between the SOI layer and the Si-substrate, which serves as reference. Strain values in the SOI show an off-set of $\Delta\varepsilon = 0.2\%$ in comparison to the unstrained Si-substrate. The miscut between SOI and Si-substrate is estimated to 0.3° . In transistor devices with tensile stress overlayers DFH is able to measure $\varepsilon = +0.3\%$ tensile strain in excellent agreement with finite-element simulations. In devices with compressive overlayers and SiGe-source/drain a strain value of only $\varepsilon = -(0.1 \pm 0.05)\%$ can be determined in the transistor channel 5 nm beneath the gate oxide.

Symbol- und Abkürzungsverzeichnis

Koordinaten

$\mathbf{R} = (x, y, z)^T$	dreidimensionaler Ortsvektor
$\mathbf{r} = (x, y)^T$	zweidimensionaler Ortsvektor senkrecht zur optischen Achse (z-Achse)
z	optische Achse (positiv in Elektronenflugrichtung)
$\mathbf{Q} = (q_x, q_y, q_z)^T$	Vektor im dreidimensionalen Fourierraum
$\mathbf{q} = (q_x, q_y)^T$	Vektor im zweidimensionalen Fourierraum senkrecht zur optischen Achse (q_z -Achse)

Symbole

\mathbf{K}_0	Wellenzahlvektor der ebenen Welle
$\mathbf{k}_0 = (k_{0x}, k_{0y})^T$	Komponente des Wellenzahlvektors senkrecht zur optischen Achse
k_{0z}	Komponente des Wellenzahlvektors parallel zur optischen Achse
q_c	Trägerfrequenz des Interferenzmusters im Hologramm
$\mathbf{u} = (u_x, u_y, u_z)^T$	Verschiebungsvektor
λ	Wellenlänge
ε_{ik}	Deformation bzw. Dehnung (kompressiv: $\varepsilon_{ik} < 0$, tensil: $\varepsilon_{ik} > 0$)
γ_{ik}	Scherung
ω_{ik}	Rotation
σ_{ik}	mechanische Spannung
c_{ik}	Elastizitätskonstante des Steifigkeitstensors

Funktionen

$\mathcal{FT} \{ \psi(\mathbf{r}) \} = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(\mathbf{r}) \exp(-i2\pi \mathbf{g} \cdot \mathbf{r}) d\mathbf{r} = \tilde{\psi}(\mathbf{g})$	Fouriertransformation
$\mathcal{FT} \{ \tilde{\psi}(\mathbf{g}) \} = \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\psi}(\mathbf{g}) \exp(+i2\pi \mathbf{g} \cdot \mathbf{r}) d\mathbf{r} = \psi(\mathbf{r})$	inverse Fouriertransformation

Abkürzungen

TEM	Transmissionselektronenmikroskop(ie)
HRTEM	Hochauflösende Transmissionselektronenmikroskopie (High Resolution Transmission Electron Microscopy)
DF	Dunkelfeld
HF	Hellfeld
DFH	Dunkelfeldholographie
NBD	Nanobeugung (Nano-Beam Electron Diffraction)
FIB	Gerät zur Probenpräparation unter Benutzung eines Fokussierten Ionenstrahls (Focused Ion Beam)
MOSFET	Metal Oxide Semiconductor Field Effect Transistor
SOI	Herstellungstechnologie für Schaltkreise auf Basis von Silizium-Substraten, die sich auf einem Isolator befinden (Silicon on Insulator)
PEN	Mit plasmaunterstützter chemischer Gasphasenabscheidung abgeschiedene, kompressiv (CPEN) oder tensil (TPEN) verspannte Deckschicht aus Siliziumnitrid (Plasma Enhanced Nitride)

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	3
2	Grundlagen der Elastizitätstheorie	7
2.1	Der Verzerrungstensor	7
2.2	Der Spannungstensor	11
2.3	Das Hooke'sche Gesetz	12
2.4	Zusammenfassung	13
3	Mechanisch gespannte Transistoren	15
3.1	Der MOSFET	15
3.2	Techniken zur Spannungserzeugung	16
3.2.1	SiGe- und Si:C-Source/Drain-Gebiete	17
3.2.2	Verspannte Deckschichten	18
3.3	Mechanische Verspannung und Ladungsträgerbeweglichkeit	19
3.4	Zusammenfassung	20
4	Beugungswelle und geometrische Phase	23
4.1	Transmissionselektronenmikroskopie	23
4.1.1	Aufbau eines Transmissionselektronenmikroskops	24
4.1.2	Hellfeld- und Dunkelfeldabbildung	25
4.2	Beugung am Kristallgitter	27
4.2.1	Bragg- und Laue-Beugungsbedingung	27
4.2.2	Ewaldkugel	28
4.2.3	Beugungswelle	29
4.3	Geometrische Phase	30
4.3.1	Geometrische Phase in kinematischer Näherung	30
4.3.2	Veranschaulichung der geometrischen Phase am Elementargitter	32
4.3.3	Grenzen der geometrischen Phase	36
4.3.4	Geometrische Phase bei dynamischer Streuung	37
4.3.4.1	Streuung im deformierten Kristall	38
4.3.4.2	Zweistrahlfall im deformierten Kristall	41
4.3.4.3	Analytische Lösung für z-unabhängige Verschiebung	41
4.3.4.4	Näherungslösung für z-abhängige Verschiebung	42
4.3.4.5	Konsequenzen für die Deformationsmessung	44
4.4	Zusammenfassung	48
5	Spezialverfahren der Dunkelfeld off-axis Elektronenholographie	51
5.1	Aufnahme von Dunkelfeldhologrammen	52
5.1.1	Voraussetzungen	52
5.1.2	Versuchsaufbau	52
5.1.3	Rekonstruktion der Beugungswelle	55
5.2	Bestimmung der Gitterdeformation	55
5.2.1	Gitterdeformation in g_{ref} -Richtung	55

5.2.2	Gitterdeformation in (x, y) -Ebene	57
5.3	Optimierung des Tecnai F20 Mikroskops für die Dunkelfeldholographie	60
5.3.1	Anforderungen	60
5.3.2	Limitierungen durch experimentellen Aufbau	60
5.3.3	Zusätzliche Freiheitsgrade mit Cs-Korrektor und Pseudo-Lorentz Linse	62
5.3.4	Verbleibende Limitierungen	63
5.3.4.1	Begrenzte Beleuchtungskippung	63
5.3.4.2	Defokussierte Blende in der hinteren Brennebene	67
5.4	Aufbereitung und Rekonstruktion von Dunkelfeldhogrammen	68
5.4.1	Beseitigen fehlerhafter Pixel	69
5.4.2	Entfernen der Fresnelschen Beugungssäume	69
5.4.3	Wahl der Rekonstruktionsmaske	73
5.4.4	Filterung der Hologrammintensität mit Wiener-Filter	77
5.5	Einfluss und Korrektur von Verzeichnungen	79
5.5.1	Verzeichnungskorrektur mittels Leerwelle	80
5.5.2	Verzeichnungskorrektur mittels Verzeichnungskarte	80
5.5.3	Vergleich der Korrekturmethode	84
5.6	Vorzeichen der Beugungswelle	88
5.7	Numerische Ableitung der Phase und Rauschen	93
5.8	Kalibrierung von Phasen- und Deformationskarte	96
5.9	Glättung der Dehnungskarte	98
5.10	Aufzeichnung und Rekonstruktion einer Dunkelfeldhologrammserie	100
5.11	Maximierung der Intensität in der Beugungswelle	106
5.11.1	Zweistrahlfall und gekippte Dunkelfeldbeleuchtung	106
5.11.2	Optimale Probendicke	108
5.12	Einfluss der Objektkippung an Grenzflächen	110
5.13	Präparationseinflüsse	113
5.13.1	Curtaining	113
5.13.2	Relaxation in FIB-Lamellen	117
5.13.3	Amorphe Oberflächen	119
5.13.4	Verbiegung von FIB-Lamellen	119
5.14	Zusammenfassung	121
6	Verspannungsmessungen an aktuellen Halbleiterstrukturen	123
6.1	Gitterdeformation in SiGe-Schicht auf Si-Substrat	124
6.2	Mit SiGe verspannte Transistoren auf Bulk-Silizium	129
6.2.1	Transistorstrukturen mit SiGe- Σ -Source/Drain-Gebieten	129
6.2.2	Vergleich von Dunkelfeldholographie und Nanobeugung	133
6.3	Mit SiGe verspannte Transistoren auf Silicon-on-Insulator (SOI)	139
6.4	Transistorstrukturen mit verspannten Deckschichten	146
6.4.1	Erste Experimente	146
6.4.2	Mittels Wolframschicht verspannte Teststruktur	148
6.4.3	Mittels TPEN-Schicht verspannter n-MOSFET	150
6.4.4	Mittels CPEN-Schicht und SiGe verspannter p-MOSFET	150
6.5	Zusammenfassung	154
7	Zusammenfassung	155
	Literaturverzeichnis	161

1 Einleitung

Die fortschreitende Verkleinerung von Halbleiterstrukturen ermöglicht, einen einzelnen Mikroprozessor aus immer mehr Transistoren und Schaltkreisen aufzubauen, während gleichzeitig dessen Leistungsfähigkeit steigt, jedoch sein Energieverbrauch und seine Herstellungskosten sinken. So verringerte sich die Strukturbreite moderner Transistoren in den letzten 40 Jahren von $10\text{ }\mu\text{m}$ auf unter 30 nm . Jedoch traten mit Einführung der 90 nm Strukturbreite erstmals physikalische Grenzen bei der Skalierung von Metal-Oxid-Halbleiter Feld-Effekt Transistoren (MOSFETs) zu Tage. Die Verringerung der Gatelänge und ein immer dünneres Gateoxid führen zu unerwünschten physikalischen Effekten, wie elektrischen Durchbrüchen, Leckströmen und Kurzkanaleffekten, welche die Beweglichkeit der Ladungsträger im Transistorkanal und den Steuerstrom eines Transistors herabsetzen. Daher entwickelt die Halbleiterindustrie unablässig eine Vielzahl neuer Strukturen und Materialien, welche die nachteiligen Effekte der Skalierung nicht nur kompensieren, sondern möglichst eine weitere Steigerung der Leistungsfähigkeit von MOSFETs bei gleichzeitig sinkendem Energieverbrauch ermöglichen. Der mit Abstand wichtigste *technology booster* ist das sogenannte *strain engineering*, die gezielte mechanische Verspannung des Siliziums im Gatekanal eines MOSFETs, da er sich mit geringen Kosten und ohne große technologische Risiken in die bereits bestehenden Fertigungsprozesse von MOSFETs integrieren lässt. Vor allem lässt sich die Technologie auch bei zukünftigen nochmals deutlich kleineren Strukturbreiten und veränderten Bauelementgeometrien, wie Tri-Gate-Transistoren oder Fin-FETs, anwenden. Durch Deformation des Siliziums im Kanalbereich eines Transistors lässt sich die Bandstruktur von Silizium gezielt verändern, so dass die Beweglichkeit der Ladungsträger im Gatekanal erhöht wird (ca. 35 % für Elektronen und ca. 50 % für Löcher bei Deformationen um $\varepsilon = 0,5\%$). Eine Stauchung (kompressive Deformation) verbessert die Löcherbeweglichkeit im p-MOSFET und Zug (tensile Deformation) die Elektronenbeweglichkeit im n-MOSFET. Dadurch lassen sich die Geschwindigkeit der Ladungsträger im Gatekanal und der Arbeitsstrom des MOSFETs steigern, obwohl die Dicke des Gateoxids und die Steuerspannung des MOSFETs unverändert bleiben. Somit gelingt es, Kurzkanaleffekte zu vermeiden, den Energieverbrauch zu senken und die Schaltgeschwindigkeit des Transistors zu verbessern (CHU *et al.* 2009).

Um den Kanalbereich eines MOSFETs mechanisch zu verspannen, existieren verschiedene Techniken: Weit verbreitet sind ins Si-Substrat eingebettete SiGe-Stressoren an Source und Drain oder verspannte Deckschichten aus Silizumnitrid. Auch nachfolgende Prozessschritte, wie die Abscheidung weiterer Deckschichten, das Einbringen von Kontakten und Leitungsbahnen sowie die weitere thermische Behandlung können die mechanische Spannung im vollprozessierten Bauelement beeinflussen. Daher benötigt die Halbleiterindustrie für Kontrolle und Analyse der mechanischen Verspannungsfelder sowohl während verschiedener Prozessschritte als auch im vollprozessierten Bauelement eine physikalische Messmethode, die in der Lage ist, diese Verspannungen lokal mit der nötigen Lateral- und Signalauflösung zu vermessen. Aus der in der *International Technology Roadmap for Semiconductors (ITRS)* angestrebten Verbesserung der elektrischen Leistungsparameter eines Bauelements bei mechanischer Verspannung lassen sich die Anforderungen an die Messmethode hinsichtlich der Signalauflösung ableiten (ITRS 2008). So wird für die aktuelle Technologiegeneration eine Signalauflösung im Bereich von $\Delta\varepsilon = 0,1 \dots 0,01\%$ für Deformationen von $\varepsilon = 0 \dots 2\%$

	DFH	HRTEM+GPA	NBD	CBED
Signalauflösung $\Delta\epsilon/\%$	0,05 ^a ; 0,02 ^d	0,1 ^c	0,1 ^{d,e}	0,02 ^f
Lateralauflösung δ/nm	3...8 ^a ; 4 ^b ; 6 ^d	2...4 ^c	3 ^e ; 6 ^d ; 10 ^d	10 ^f
Gesichtsfeld $FOV/\text{nm} \times \text{nm}$	800 × 800 ^a 500 × 1500 ^b	150 × 150 ^c	Linienprofil: 500 nm ^d	Rastern: 500 × 500 ^f
optimale Probendicke t_{opt}/nm	120 ^a ; 150 ^b	50 ^c	200 ^d	> 300 ^f
spezielle TEM-Ausstattung	Biprisma + Lorentz Linse	Hardware- aberrations- korrektor	Kondensor- blende < 10 μm	

Tabelle 1.1: Vergleich verschiedener TEM-basierter Techniken zur Messung mechanischer Verspannungen in Halbleiterbauelementen.

^a Vorliegende Arbeit

^b HÛTCH *et al.* (2008)

^c HÛE *et al.* (2008)

^d COOPER *et al.* (2010b)

^e BÉCHÉ *et al.* (2009)

^f ARMIGLIATO *et al.* (2005)

gewünscht. Die Abmessungen des Bauelements bestimmen hingegen die Anforderungen an die Lateralauflösung. So verlangen Strukturbreiten 45...22 nm eine Lateralauflösung < 5 nm. Aufgrund der geringen Strukturbreiten sind bisher einzig TEM-basierte¹ Verfahren in der Lage, die nötige Lateralauflösung von nur wenigen Nanometern zu erzielen. Neben rasternden, auf Auswertung von Beugungsbildern beruhenden Methoden wie Konvergente Elektronenbeugung (CBED) oder Nanobeugung (NBD) existieren auch abbildende TEM-Methoden wie hochaufgelöste Transmissionselektronenmikroskopie (HRTEM) in Kombination mit Geometrischer Phasenanalyse (GPA) sowie Dunkelfeld in-line Elektronenholographie und Dunkelfeld off-axis Elektronenholographie (DFH).

Diese Arbeit befasst sich mit der Dunkelfeld off-axis Elektronenholographie als nanoskalige holographische Interferometriemethode. Die DFH wurde ursprünglich von Karl-Josef Hanszen 1981 als Verfahren zur Aufzeichnung und Rekonstruktion der Beugungswelle eines Kristalls in Amplitude und Phase beschrieben (HANSZEN *et al.* 1981). Obwohl bereits Hanßen erkannt hatte, dass jede an einem Kristall gebeugte Welle die Information über die laterale Position der Atome im Kristallgitter als Phasenfaktor trägt, gelang es erst Martin HÛtch 2008 erfolgreich zu demonstrieren, wie aus der aufgezeichneten Phase der Beugungswelle die Information über das mechanische Spannungsfeld in einem Halbleiterkristall abgeleitet werden kann (HÛTCH *et al.* 2008). Die DFH basiert auf der Überlagerung von zwei Teilen ein und derselben Beugungswelle: Mittels eines elektrostatischen Biprismas wird der aus dem verspannten Kristallbereich stammende Teil der Beugungswelle mit dem aus einem angrenzenden unverspannten Referenzkristallbereich stammenden Teil der Beugungswelle zur Überlagerung gebracht. Aus dem in der Bildebene aufgezeichneten Interferenzmuster wird mittels Fourieranalyse die Phase der Beugungswelle rekonstruiert. Deren Gradientenfeld ist letztlich proportional zum mechanischen Spannungsfeld im Kristall.

Die DFH besitzt eine Reihe von Vorteilen gegenüber den anderen TEM-Methoden. Zur Veranschaulichung gibt Tabelle 1.1 einen Überblick über die Leistungsparameter

¹TEM: Transmissionselektronenmikroskop(ie)

der genannten TEM-Methoden. Diese Arbeit wird zeigen, dass die DFH eine Spannungsmessung mit $3 \dots 8 \text{ nm}$ Lateralauflösung bei Gesichtsfeldern von $200 \times 200 \text{ nm}^2$ bis zu $800 \times 800 \text{ nm}^2$ ermöglicht, während sich gleichzeitig eine Signalauflösung im Bereich von $\Delta\epsilon = 0,1 \dots 0,05 \%$ realisieren lässt. Insgesamt bietet die DFH den besten Kompromiss aus Gesichtsfeld, Lateral- und Signalauflösung. So besitzt zwar CBED eine leicht bessere Messgenauigkeit, jedoch lassen sich experimentelle CBED-Bilder nur durch umfangreiche Vergleiche mit Simulationen auswerten. CBED reagiert äußerst empfindlich gegenüber Relaxation und Verbiegung von TEM-Lamellen mit einer Aufspaltung der HOLZ-Linien in den experimentellen CBED-Bildern, was den Vergleich mit den simulierten CBED-Bildern erschwert. Zur Vermeidung dieser Effekte müssen sehr dicke Proben verwendet werden. Da allerdings zur Aufnahme von CBED-Bildern der Kristall weit aus der niedrig indizierten Zonenachse verkippt werden muss, treten verstärkt Projektionseffekte an Kanten und Grenzflächen auf, die letztlich zur reduzierten Lateralauflösung von nur ca. 10 nm führen. HRTEM kombiniert mit GPA erzielt zwar die mit Abstand beste Lateralauflösung mit ca. 2 nm , jedoch sind die Gesichtsfelder auf unter $150 \times 150 \text{ nm}^2$ begrenzt; das ist zu klein, um mehrere Transistoren mit den sie umgebenden Spannungsfeldern abzubilden. Des weiteren ist das Signal-Rausch-Verhältnis in der rekonstruierten Phase von HRTEM-Bildern üblicherweise schlechter als in der DFH. Die geringe Objektdicke der TEM-Lamellen begünstigt zudem die Relaxation des Spannungszustands. Außerdem empfiehlt sich, zur Aufnahme der HRTEM-Bilder ein TEM mit Hardwareaberrationskorrektor zu benutzen. NBD benötigt dagegen nur eine ca. $10 \mu\text{m}$ kleine Kondensoraperturblende, um die TEM-Lamelle mit einer feinfokussierten Elektronensonde abrastern zu können. Deformationen des Kristallgitters werden aus der Verschiebung der Reflexe in den Nanobeugungsbildern im verspannten gegenüber dem unverspannten Kristall bestimmt. Die Empfindlichkeit der Spannungsmessung ist vergleichbar mit GPA, aber schlechter als in der DFH. Die Lateralauflösung ist vergleichbar zur DFH. Die größeren Objektdicken reduzieren den Einfluss der Relaxation. Da es sich bei NBD um eine Rastermethode handelt, lässt sich mit ihr das Spannungsfeld nur entlang einzelner Linienprofile vermessen; obwohl experimentell möglich, würde ein zweidimensionales Rastern des kompletten Spannungsfeldes im Transistorkanal zu lange dauern. Dagegen liefert die DFH als abbildende TEM-Methode aus einem einzigen Dunkelfeldhologramm direkt eine zweidimensionale Karte des mechanischen Spannungsfelds. Die Probendicken liegen bei DFH ebenfalls noch in einem Bereich, in dem der Einfluss der Relaxation gering ist. Im Gegensatz zu den anderen Methoden stellt die DFH höhere Anforderungen an die TEM-Ausstattung: Man benötigt ein TEM mit Feldemissionsquelle, ein elektrostatisches Biprisma zur Überlagerung der Teilwellen und eine Lorentz Linse, um die nötigen Gesichtsfelder und Lateralauflösungen erzielen zu können.

Ziel der vorliegenden Arbeit ist es, die DFH zu einer Standardmethode zur hochpräzisen Messung von Deformationen in Halbleiterstrukturen zu entwickeln. Dazu wird seitens der Halbleiterindustrie, namentlich von *GLOBALFOUNDRIES*, eine Genauigkeit besser als $\Delta\epsilon = 0,1 \%$ und eine Lateralauflösung von etwa $\delta = 10 \text{ nm}$ angestrebt. Wie Tabelle 1.1 bereits andeutet wird die Grenzleistung der DFH bestimmt und es werden Vorteile gegenüber anderen Verfahren diskutiert. Es erfolgt eine Einordnung und Interpretation der DFH-Ergebnisse gegenüber der in Lateral- und Signalauflösung äquivalenten Methode der NBD. Schließlich wird die DFH auf industriell gefertigte Halbleiterstrukturen von *GLOBALFOUNDRIES* angewendet. Entwicklungsbedarf besteht hierbei insbesondere hinsichtlich der Anpassung auf komplizierte räumliche Geometrien. Außerdem sind Anwendbarkeit und Funktionalität hinsichtlich der Silicon-on-Insulator-Technologie zu klären.

Im Anschluss dieser als Kapitel 1 betitelten Einleitung beleuchtet Kapitel 2 kurz die Grundlagen der Elastizitätstheorie, die im weiteren Verlauf für die Messung mechanischer Spannungen und die Darstellung der Ergebnisse benötigt werden. Die Begriffe Verschiebung, Verzerrung und Spannung werden definiert und an einfachen Beispielen erläutert.

Kapitel 3 beschreibt den Aufbau eines MOSFET und stellt die in dieser Arbeit untersuchten Techniken zur Spannungsgeneration im Transistorkanal vor.

Kapitel 4 geht zunächst auf die Grundlagen der geometrischen Phase in der Beugungswelle ein. So wird die Entstehung von Beugungswellen und deren Abbildung im TEM vorgestellt. Anschließend wird erläutert, wie einerseits eine Deformation des Kristallgitters senkrecht zur einfallenden Elektronenwelle, die geometrische Phase der Beugungswelle moduliert, und wie andererseits aus den Gradienten in der geometrischen Phase auf das Deformationsfeld im Kristall geschlossen werden kann. Abschließend soll der Einfluss von Deformationen parallel zur einfallenden Elektronenwelle auf die in der Bildebene aufgezeichnete zweidimensionale Phasenverteilung der Beugungswelle abgeschätzt und dessen Bedeutung für die Deformationsmessung diskutiert werden.

Kapitel 5 befasst sich mit sämtlichen, methodischen Aspekten der DFH. Der experimentelle Aufbau und das experimentelle Vorgehen bestehend aus Aufnahme und Rekonstruktion eines Dunkelfeldhologramms werden im Detail vorgestellt, sowie die Ableitung der Deformationsverteilung aus der rekonstruierten Phase gezeigt. Um die DFH an neue Grenzen hinsichtlich Gesichtsfeld, Lateral- und Signalauflösung zu treiben, werden neue experimentelle Möglichkeiten aufgezeigt. Daneben wird auf verschiedene methodisch bedingte Artefakte hingewiesen und ihr Einfluss auf die Verspannungsmessung diskutiert, um daraus Möglichkeiten zur Vermeidung oder nachträglichen Korrektur dieser Artefakte zu entwickeln. Das Kapitel beschäftigt sich auch mit Präparations- und Objekteinflüssen, wie Objektdicke und -kipfung, auf die Verspannungsmessung.

Kapitel 6 stellt verschiedene Anwendungen der DFH zur Verspannungsmessung an aktuellen Halbleiterstrukturen von *GLOBALFOUNDRIES* vor. Die DFH-Ergebnisse werden mit NBD-Messungen und Finite-Elemente-Simulationen verglichen. Insbesondere wird auf die speziellen Herausforderungen bei Silicon-on-Insulator-Strukturen und Transistoren mit verspannten Deckschichten eingegangen.

Kapitel 7 fasst die Ergebnisse dieser Arbeit zusammen und diskutiert offene oder neue Fragen.

2 Grundlagen der Elastizitätstheorie

Diese Kapitel behandelt die Grundlagen der Elastizitätstheorie, die im späteren Verlauf der Arbeit für die Messung mechanischer Spannungen und die Darstellung der Ergebnisse benötigt werden. Es werden die Begriffe *Verschiebung*, *Verzerrung* und *Spannung* eingeführt. Sie werden zunächst an einfachen Beispielen anschaulich erläutert, bevor eine exakte mathematische Definition erfolgt.

2.1 Der Verzerrungstensor

Ein Körper kann durch Einfluss einer äußern Kraft sowohl seine Form als auch sein Volumen ändern. Man spricht von einer Deformation des Körpers. Um diese zu beschreiben, führt man den Verschiebungsvektor \mathbf{u} und den Verzerrungstensor ε_{ij} ein. Beide Größen lassen sich bereits an dem Beispiel des eindimensional in x -Richtung deformierten Stabes in Abbildung 2.1 diskutieren. Die Punkte x_0 und $x_0 + dx$ besitzen vor der Deformation den Abstand dx . Eine Deformation des Stabes bewirkt eine Verschiebung des Punktes x_0 an die neue Position x'_0 und des Punktes $x_0 + dx$ an $x'_0 + dx'$; der neue Abstand der Punkte beträgt dx' . Der Vektor $\mathbf{u}(x_0) = u_x(x_0)$ beschreibt die Verschiebung von x_0 nach x'_0 und der Vektor $\mathbf{u}(x + dx) = u_x(x + dx)$ beschreibt die Verschiebung von $x_0 + dx$ nach $x'_0 + dx'$. Die Koordinaten des verschobenen Punktes erhält man durch Addition der Koordinate des Punktes vor der Deformation mit dem Verschiebungsvektor dieses Punktes; der Verschiebungsvektor selbst hängt von der Koordinate des Punktes vor der Deformation ab:

$$\begin{aligned} x'_0 &= x_0 + u_x(x_0) \\ x'_0 + dx' &= x_0 + dx + u_x(x_0 + dx). \end{aligned} \quad (2.1)$$

Als Maß für die Deformation des Stabes in x -Richtung ε_{xx} dient die Änderung des Abstandes der Punkte $dx' - dx$ nach der Deformation bezogen auf den Abstand dx vor der Deformation:

$$\varepsilon_{xx} := \frac{dx' - dx}{dx}. \quad (2.2)$$

Der Abstand dx' lässt sich mit Hilfe der Verschiebungsvektoren und den Koordinaten vor der Deformation ausdrücken:

$$dx' = (x'_0 + dx') - x'_0 = (x_0 + dx + u_x(x + dx)) - (x_0 + u_x(x_0)) = dx + u_x(x + dx) - u_x(x_0). \quad (2.3)$$

Setzt man den Ausdruck (2.3) in die Definition (2.2) ein, kann die Deformation als Differenz der Verschiebungen der beiden Punkte $u_x(x + dx) - u_x(x_0)$ bezogen auf den Abstand der Punkte dx geschrieben werden:

$$\varepsilon_{xx} := \frac{u_x(x + dx) - u_x(x_0)}{dx} \approx \frac{\partial u_x(x)}{\partial x}. \quad (2.4)$$

Für infinitesimale Abstände geht dieser Differenzenquotient in eine Ableitung der Verschiebung $u_x(x)$ nach x über.

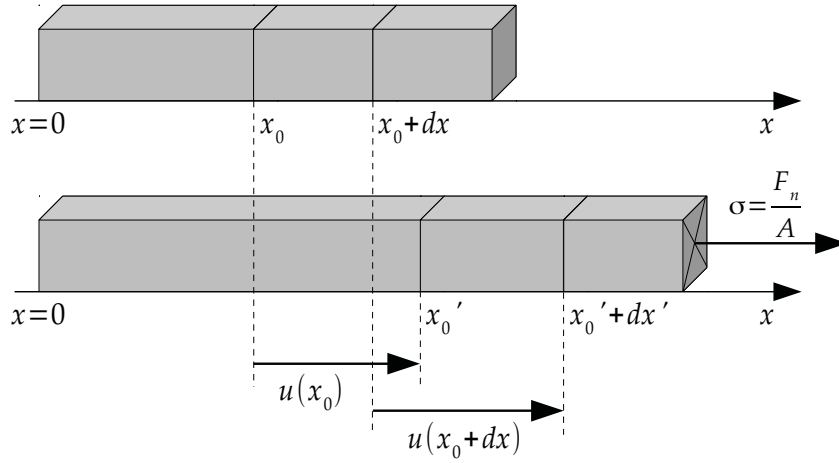


Abbildung 2.1: Eindimensionale Verzerrung am Beispiel eines gedehnten Stabes.

Dieses eindimensionale Beispiel lässt sich auf drei Dimensionen verallgemeinern (LANDAU und LIFSHITZ 1983). Jeder Punkt eines Körpers wird durch seinen Ortsvektor $\mathbf{R} = (x, y, z)^T = (x_1, x_2, x_3)^T$ beschrieben. Wird der Körper verformt, so wird jeder Punkt verschoben. Wenn \mathbf{R} die Position des Punktes vor der Deformation war, so besitzt er nach der Deformation die Position $\mathbf{R}' = (x'_1, x'_2, x'_3)^T$. Die Verschiebung des Punktes wird durch den Verschiebungsvektor

$$\mathbf{u}(\mathbf{R}) = \mathbf{R}'(\mathbf{R}) - \mathbf{R} \quad (2.5)$$

mit den Komponenten

$$u_i(x_1, x_2, x_3) = x'_i(x_1, x_2, x_3) - x_i \quad (2.6)$$

ausgedrückt. Die Koordinaten x'_i des verschobenen Punktes sind Funktionen der Koordinaten x_i des Punktes vor der Verschiebung. Daher ist auch der Verschiebungsvektor eine Funktion der Koordinaten x_i . Wie in dem eindimensionalen Beispiel betrachtet man auch im dreidimensionalen Fall die Änderung des Abstandes zweier infinitesimal benachbarter Punkte vor und nach der Deformation. Wenn $d\mathbf{R}$ mit den Komponenten dx_i der Abstandsvektor der beiden Punkte vor der Deformation ist, besitzen die selben Punkte nach der Deformation den Abstandsvektor $d\mathbf{R}' = d\mathbf{R} + d\mathbf{u}$ mit den Komponenten $dx'_i = dx_i + du_i$. Der Abstand der Punkte beträgt vor der Deformation $|d\mathbf{R}| = \sqrt{dx_1^2 + dx_2^2 + dx_3^2}$ und nach der Deformation $|d\mathbf{R}'| = \sqrt{dx_1'^2 + dx_2'^2 + dx_3'^2}$. Um ein Maß für die Deformation angeben zu können, betrachtet man die Änderung im Quadrat des Abstandes $d\mathbf{R}^2$ vor und $d\mathbf{R}'^2$ nach der Deformation:

$$d\mathbf{R}'^2 - d\mathbf{R}^2 = \sum_{i=1}^3 dx_i'^2 - \sum_{i=1}^3 dx_i^2. \quad (2.7)$$

In dem man $dx_i'^2 = (dx_i + du_i)^2 = dx_i^2 + 2dx_i du_i + du_i^2$ und das totale Differential $du_i = \sum_k \frac{\partial u_i}{\partial x_k} dx_k$ in Gleichung (2.7) ersetzt, ergibt sich:

$$d\mathbf{R}'^2 - d\mathbf{R}^2 = 2 \sum_{i=1}^3 \sum_{k=1}^3 \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \sum_{l=1}^3 \frac{\partial u_l}{\partial x_i} \frac{\partial u_l}{\partial x_k} \right) dx_i dx_k = 2\varepsilon_{ik} dx_i dx_k, \quad (2.8)$$

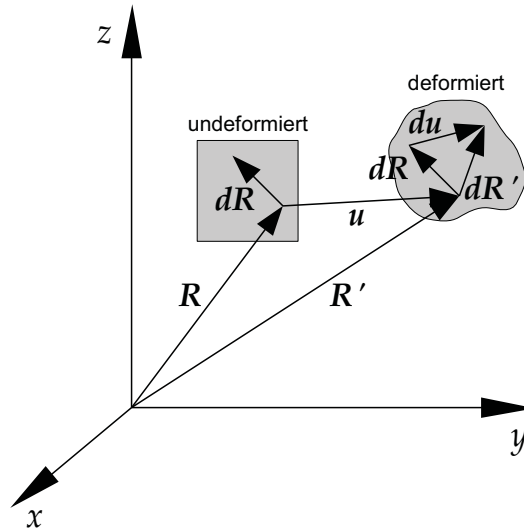


Abbildung 2.2: Deformation eines Körpers in drei Dimensionen. Nach der Deformation des Körpers besitzt der Ortsvektor R die neue Koordinate $R' = R + u$. Der benachbarte Ortsvektor $R + dR$ besitzt die neue Koordinate $R' + dR' = R + dR + u(R + dR)$.

womit man den Verzerrungstensor (Deformationstensor)

$$\varepsilon_{ik} := \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i} + \sum_{l=1}^3 \frac{\partial u_l}{\partial x_i} \frac{\partial u_l}{\partial x_k} \right). \quad (2.9)$$

definiert. Die Verschiebungen weisen die physikalische Dimension einer Länge auf. Die Ableitungen der Verschiebungskomponenten nach den kartesischen Koordinaten sind daher dimensionslos. Deshalb sind auch die Komponenten des Verzerrungstensor in kartesischen Koordinaten dimensionslos. Aus der Definition des Verzerrungstensor ist sofort ersichtlich, dass er symmetrisch ist, d.h. es gilt $\varepsilon_{ik} = \varepsilon_{ki}$. Da die in dieser Arbeit betrachteten Deformationen klein sind, d.h. $\partial u_i / \partial x_k \ll 1$, reicht es aus, den linearisierten Verzerrungstensor

$$\varepsilon_{ik} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i} \right) = \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} & \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{xz} \\ \varepsilon_{yx} & \varepsilon_{yy} & \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{zx} & \varepsilon_{zy} & \varepsilon_{zz} \end{pmatrix}. \quad (2.10)$$

auszuwerten. Die partiellen Ableitungen $\partial u_i / \partial x_k$ bezeichnen die neun Komponenten des Verschiebungsgradienten. Da die Verschiebungsableitungen im Ausdruck des linearisierten Verzerrungstensors voraussetzungsgemäß klein gegen eins sind, gilt auch $\varepsilon_{ik} \ll 1$. Die Normalkomponenten ε_{ii} des Verzerrungstensors beschreiben Verzerrungen entlang der Koordinatenachsen. Dagegen enthalten die Nebendiagonalkomponenten ε_{ik} ($i \neq k$) die Information über Scherung und Rotation des Körpers. Der Verzerrungstensor ε_{ik} ist der symmetrische Teil des Tensors $\partial u_i / \partial x_k$ in Gleichung (2.8). Dieser beschreibt zunächst nur reine Verzerrungen, d.h. Dehnung, Stauchung und Scherung des Körpers. Er lässt sich erweitern, um auch Rotationen zu berücksichtigen:

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_k} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i} \right) + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_k} - \frac{\partial u_k}{\partial x_i} \right) = \varepsilon_{ik} + \omega_{ik}. \quad (2.11)$$

mit ω_{ik} als antisymmetrischem Anteil, der die Rotationen beschreibt. Den Unterschied

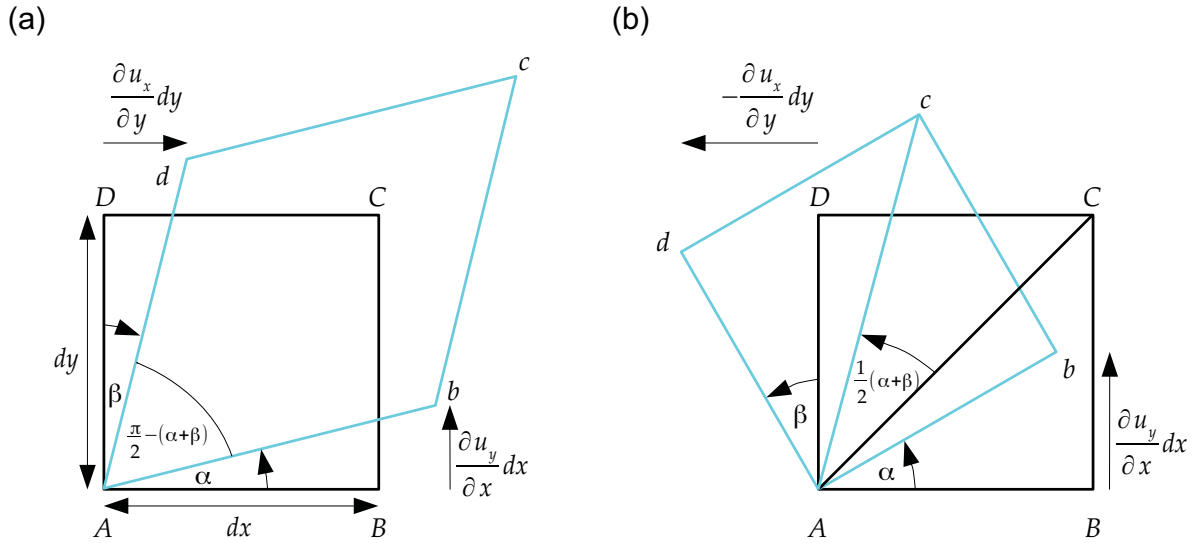


Abbildung 2.3: Scherung und Rotation in zwei Dimensionen am Beispiel eines Quadrats. a) Scherung des Rechtecks entlang der Diagonalen \overline{AC} führt zu einer Änderung des Winkels bei A um $\pi/2 - (\alpha + \beta)$. b) Rotation um den Punkt A führt zu einer Drehung der Diagonalen \overline{AC} um den Winkel $(\alpha + \beta)/2$ gegen den Uhrzeigersinn.

zwischen Scherung und Rotation eines Körpers illustriert Abbildung 2.3 am Beispiel eines Quadrats. Das Quadrat $ABCD$ in Abbildung 2.3a wird entlang der Diagonalen \overline{AC} gedehnt und zur Raute $abcd$ verformt. Dabei wird die Kante \overline{AB} des Quadrats um den Winkel $\alpha = \partial u_y / \partial x$ auf die Kante \overline{Ab} der Raute verschoben. Die Flächen parallel zur Kante \overline{AD} werden um den Winkel α geschert. Außerdem wird die Kante \overline{AD} des Quadrats um den Winkel $\beta = \partial u_x / \partial y$ auf die Kante \overline{Ad} der Raute verschoben. Also werden auch die Flächen parallel zur Kante \overline{AB} um den Winkel β geschert. Die Scherung ändert den Winkel in der Ecke bei A von dem rechten Winkel im Quadrat vor der Deformation zu dem Winkel $\pi/2 - (\alpha + \beta)$ in der Raute nach der Deformation. Der Winkel

$$\gamma_{xy} = \gamma_{yx} = \alpha + \beta = \frac{\partial u_y}{\partial x} + \frac{\partial u_x}{\partial y} = \epsilon_{yx} + \epsilon_{xy} = 2\epsilon_{yx} = 2\epsilon_{xy} \quad (2.12)$$

ist ein Maß für die Scherung des Quadrats in der xy -Ebene. Durch zyklische Vertauschung der Indizes x, y, z erhält man die Ausdrücke für die Scherungen in der xz - und zy -Ebene im dreidimensionalen Fall.

Abbildung 2.3b beschreibt eine starre Rotation des Quadrats $ABCD$ um den Punkt A. Es tritt keine weitere Deformation auf, d.h. nach der Drehung bleibt die Form des Quadrats erhalten. Nur die Ecken des Quadrats befinden sich an den neuen Koordinaten b, c und d . Aufgrund der Rotation wird die Kante \overline{AB} des Quadrats um den Winkel $\alpha = \partial u_y / \partial x$ im Uhrzeigersinn gedreht, so dass die Kante \overline{Ab} entsteht. Die Kante \overline{AD} des Quadrats wird um den Winkel $\beta = -\partial u_x / \partial y$ im Uhrzeigersinn gedreht, so dass die Kante \overline{Ad} entsteht. Die Beträge der Winkel sind gleich groß: $|\alpha| = |\beta|$. Der Winkel

$$\omega_{xy} = \frac{1}{2}(\alpha + \beta) = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_y}{\partial x} - \frac{\partial u_x}{\partial y} \right) = \frac{1}{2}(\epsilon_{yx} - \epsilon_{xy}) = -\frac{1}{2}(\epsilon_{xy} - \epsilon_{yx}) = -\omega_{yx} \quad (2.13)$$

zwischen der Diagonalen \overline{AC} vor und der Diagonalen \overline{Ac} nach der Rotation dient als Maß für die Rotation um den Punkt A in der xy -Ebene. Durch zyklische Vertauschung der Indizes

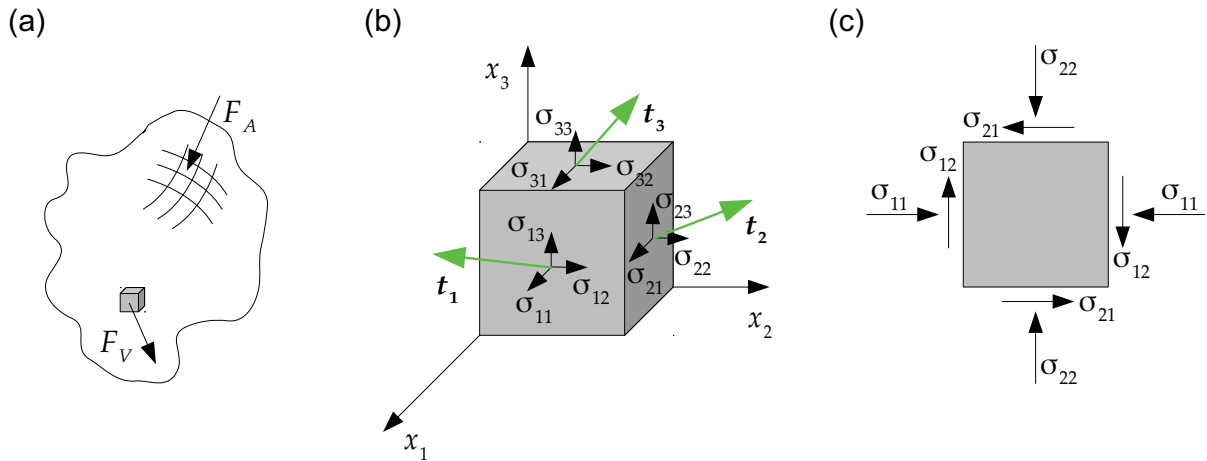


Abbildung 2.4: a) Verformung eines Körpers aufgrund von Flächenkräften F_A und Volumenkräften F_V . b) Spannungsvektor t_i mit den Komponenten σ_{ij} . c) Kompensation von Spannungs- und Scherkomponenten im Gleichgewicht.

x, y, z ergeben sich die Ausdrücke für die Komponenten der Rotation in der xz - und zy -Ebene im dreidimensionalen Fall.

2.2 Der Spannungstensor

Verformungen resultieren aus äußeren Kräften (Flächenkräfte F_A) und inneren Kräften (Volumenkräfte F_V) gemäß Abbildung 2.4a. Für einen beliebig orientierten Schnitt durch den Körper erhält man den Spannungsvektor

$$t := \lim_{\Delta A \rightarrow 0} \frac{F}{\Delta A} \quad (2.14)$$

Dabei wird vorausgesetzt, dass nur Kräfte und keine Drehmomente übertragen werden. Der Spannungsvektor beschreibt die Kraft F , die auf ein infinitesimales Flächenelement ΔA in einem Körper wirkt und besitzt die physikalische Dimension eines Drucks. Abbildung 2.4b illustriert am Beispiel eines Würfels, wie sich der Spannungszustand des Körpers in einem kartesischen Koordinatensystem beschreiben lässt. Auf den Flächen des Würfels erhält man die drei Spannungsvektoren:

$$t_i = \begin{pmatrix} t_{i1} \\ t_{i2} \\ t_{i3} \end{pmatrix}, \quad (i = 1, 2, 3), \quad (2.15)$$

wobei t_{i1} , t_{i2} und t_{i3} die Spannungskomponenten auf der jeweiligen Würfelfläche darstellen. In ausführlicher Form kann dies als Spannungstensor ausgedrückt werden:

$$\sigma_{ik} := (t_1, t_2, t_3)^T = \begin{pmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz} \end{pmatrix}. \quad (2.16)$$

Der erste Index gibt die Normalenrichtung der Bezugsebene an, der zweite Index die Wirkungsrichtung der Spannungskomponente. Der Spannungstensor besitzt 9 Komponenten. Die Hauptachsenelemente σ_{ii} geben Spannungen entlang der Koordinatenachsen an. Diese

Spannungskomponenten stehen senkrecht auf den Flächen des Würfels in Abbildung 2.4b. Die Nebendiagonalelemente σ_{ik} ($i \neq k$) bezeichnen Scherspannungen. Diese liegen in der Würfel­fläche und wirken entlang der beiden zur Würfelnormalen senkrechten Koordinatenachsen. Im Gleichgewicht müssen sich, wie in Abbildung 2.4c illustriert, alle Spannungs- und Scherkomponenten kompensieren. Wenn man unterstellt, dass die Summe der Drehmomente verschwindet (es treten keine Rotationen auf), erhält man paarweise gleiche Scherspannungen, d.h. der Spannungstensor ist symmetrisch: $\sigma_{ik} = \sigma_{ki}$. Damit reduziert sich der Spannungstensor von 9 auf 6 unabhängige Komponenten.

2.3 Das Hooke'sche Gesetz

Das Hooke'sche Gesetz stellt eine Näherung für genügend kleine Deformationen $\varepsilon_{kl} \ll 1$ dar und besagt, dass eine lineare Beziehung zwischen Spannungs- und Dehnungstensor besteht:

$$\sigma_{ij} := \sum_{k=1}^3 \sum_{l=1}^3 c_{ijkl} \varepsilon_{kl}, \quad (2.17)$$

Dabei sind die Zahlen 1, 2 und 3 der x -, y - und z -Achse zugeordnet. Dies sind 9 unabhängige Gleichungen, die den Spannungstensor σ_{ij} mit dem Verzerrungstensor ε_{ik} miteinander in Bezug setzen:

$$\begin{aligned} \sigma_{xx} &= c_{xxxx} \varepsilon_{xx} + c_{xxxy} \varepsilon_{xy} + c_{xxxz} \varepsilon_{xz} + \cdots + c_{xxzz} \varepsilon_{zz} \\ \sigma_{xy} &= c_{xyxx} \varepsilon_{xx} + c_{xyxy} \varepsilon_{xy} + c_{xyxz} \varepsilon_{xz} + \cdots + c_{xyzz} \varepsilon_{zz} \\ &\vdots \\ \sigma_{zz} &= c_{zzxx} \varepsilon_{xx} + c_{zzxy} \varepsilon_{xy} + c_{zzxz} \varepsilon_{xz} + \cdots + c_{zzzz} \varepsilon_{zz} \end{aligned} \quad (2.18)$$

Darin bezeichnet c_{ijkl} die Steifigkeitsmatrix, eine 9×9 -Matrix, deren 81 Koeffizienten sich durch materialabhängige elastische Konstanten ausdrücken lassen. Sie besitzen die Einheit eines Drucks. Für die Koeffizienten der Steifigkeitsmatrix gilt: $c_{ijkl} = c_{klij} = c_{jikl} = c_{ijlk}$. Das Hooke'sche Gesetz verknüpft die Ursache der Deformation eines Körpers, die Spannung σ_{ij} , mit deren Wirkung, der Verzerrung ε_{ik} .

Aufgrund der inhärenten Symmetrien von σ_{ij} , ε_{ik} und c_{ijkl} besitzt die Steifigkeitsmatrix c_{ijkl} nur 21 unabhängige Komponenten. Damit können die Koeffizienten vereinfachend als $11 \rightarrow 1$, $22 \rightarrow 2$, $33 \rightarrow 3$, $32 \rightarrow 4$, $31 \rightarrow 5$ und $21 \rightarrow 6$ ausgedrückt werden. Beispielsweise wird $c_{ijkl} = c_{1212} = c_{xyxy}$ zu c_{66} . Mit Hilfe dieser Vereinfachung kann die Doppelsumme in Gleichung (2.17) in eine 6×6 -Matrix überführt werden:

$$\begin{pmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{zz} \\ \sigma_{yz} \\ \sigma_{xz} \\ \sigma_{xy} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & c_{14} & c_{15} & c_{16} \\ c_{12} & c_{22} & c_{23} & c_{24} & c_{25} & c_{26} \\ c_{13} & c_{23} & c_{33} & c_{34} & c_{35} & c_{36} \\ c_{14} & c_{24} & c_{34} & c_{44} & c_{45} & c_{46} \\ c_{15} & c_{25} & c_{35} & c_{45} & c_{55} & c_{56} \\ c_{16} & c_{26} & c_{36} & c_{46} & c_{56} & c_{66} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} \\ \varepsilon_{yy} \\ \varepsilon_{zz} \\ 2\varepsilon_{yz} \\ 2\varepsilon_{xz} \\ 2\varepsilon_{xy} \end{pmatrix}. \quad (2.19)$$

Die Verspannung und die Verzerrung werden dabei als sechskomponentige Vektoren dargestellt (Voigt-Notation). In Kristallen erlauben Symmetrien, die Matrix der elastischen Koeffizienten zu vereinfachen: In Folge der Symmetrieeigenschaften von kristallinem Silizium kann die Matrix der elastischen Koeffizienten von 81 auf drei unabhängige reduziert werden

(KITTEL 1971):

$$\begin{pmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{zz} \\ \sigma_{yz} \\ \sigma_{xz} \\ \sigma_{xy} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{11} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{12} & c_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} \\ \varepsilon_{yy} \\ \varepsilon_{zz} \\ 2\varepsilon_{yz} \\ 2\varepsilon_{xz} \\ 2\varepsilon_{xy} \end{pmatrix}. \quad (2.20)$$

Tabelle 2.1 listet die elastischen Konstanten c_{11} , c_{12} und c_{44} für Silizium und Germanium auf. Somit erlaubt das Hooke'sche Gesetz bei vollständiger Kenntnis der elastischen Konstanten, eine Deformation in eine Spannung und umgekehrt umzurechnen.

	c_{11}	c_{12}	c_{44}
Si	166.0	64.0	79.6
Ge	126.0	44.0	67.7

Tabelle 2.1: Elastische Konstanten für Si und Ge in GPa (LEVINSSTEIN *et al.* 1999).

2.4 Zusammenfassung

Dieses Kapitel hat grundlegende Konzepte eingeführt, die Deformation eines Körpers zu beschreiben. Die Ursache für eine Deformation ist die Wirkung äußerer und innerer Kräfte auf die Flächen- und Volumenelemente eines Körpers. Diese Kräfte werden durch den Spannungstensor σ_{ij} erfasst. Die Spannungen bewirken eine Verschiebung $\mathbf{u}(\mathbf{R})$ der Flächen- und Volumenelemente des Körpers bezogen auf ihre ursprüngliche Lage \mathbf{R} . Die Folge ist eine Verzerrung des Körpers. Man spricht von einer Deformation. Sie wird durch den Verzerrungstensor ε_{ik} beschrieben. Das Hooke'sche Gesetz sorgt für eine lineare Verknüpfung zwischen der Ursache σ_{ij} und der Wirkung ε_{ik} .

3 Mechanisch verspannte Transistoren

Als verspannte Transistoren bezeichnet man Transistoren, die aufgrund gezielt eingebrachter mechanischer Verspannungen verbesserte elektrische Eigenschaften aufweisen. Dabei existieren bei der Herstellung eine Vielzahl von Prozessschritten, die gewollt oder ungewollt zu Verspannungen führen und als Quelle für mechanische Verspannungen genutzt werden können: verschiedene thermische Ausdehnungskoeffizienten der verwendeten Materialien, Änderungen in den Gitterkonstanten, Volumenänderungen aufgrund von Oxidations- und Silizidierungsprozessen, sowie die Abscheidung intrinsisch verspannter Schichten. Der gezielte Eintrag von mechanischen Spannungen kann einerseits durch eine Anpassung vorhandener Prozessschritte erfolgen oder andererseits die Entwicklung neuer Prozesse und Materialien erfordern. Da die meisten Verspannungsquellen nur eine lokale Wirkung besitzen und ihr Einfluss bereits nach wenigen hundert Nanometern schwindet, können sie nur für Bauelemente mit Strukturen von unter hundert Nanometern verwendet werden.

3.1 Der MOSFET

Ein MOSFET (*metal-oxide-semiconductor field-effect transistor*) ist ein elektronischer Schalter, der über die Spannung zwischen Gate und Source den Strom an Drain steuert (Abbildung 3.1). Aufgrund der Gate-Source-Spannung reichern sich Ladungsträger an der Grenzfläche zwischen Silizium und Gateoxid an. Es bildet sich ein niederohmiger Inversionskanal, der Source und Drain elektrisch verbindet. Handelt es sich bei den Ladungsträgern um Elektronen, spricht man von einem n-Kanal-MOSFET. Dagegen bedeutet p-Kanal-MOSFET, dass der Inversionskanal durch Löcher gebildet wird. Die Kombination von Transistoren zu funktionellen Grundbausteinen erlaubt es, komplexe Schaltkreise aufzubauen.

Es existieren zwei wichtige Kenngrößen, um das elektrische Verhalten eines MOSFET zu beschreiben: Die Schwellspannung U_{th} , auch Einsatzspannung (threshold voltage) genannt, ist die Steuerspannung U_{GS} (Gate-Source-Spannung) bei der sich ein Inversionskanal ausbildet. Im normalen Arbeitsbereich des Transistors hängt der Drainstrom näherungsweise linear von der Steuerspannung U_{GS} und der Drain-Source-Spannung U_{DS} ab. Der lineare Drainstrom I_D lässt sich näherungsweise angeben mit (SZE 2013):

$$I_{D,lin} = \mu \frac{C_{inv} W_G}{L_G} (U_{GD} - U_{th}) U_{DS}. \quad (3.1)$$

Die Größen L_G und W_G bezeichnen die Gatelänge und -weite und μ ist die Ladungsträgerbeweglichkeit. Die Kapazität im Inversionskanal

$$C_{inv} = \frac{\epsilon_0 \epsilon_{r,ox}}{t_{ox}} \quad (3.2)$$

hängt von der Permittivität $\epsilon_{r,ox}$ und der Dicke t_{ox} des Gateoxids ab (SZE 2013). Der lineare Drainstrom wird durch den elektrischen Kanalwiderstand R_K und den parasitären

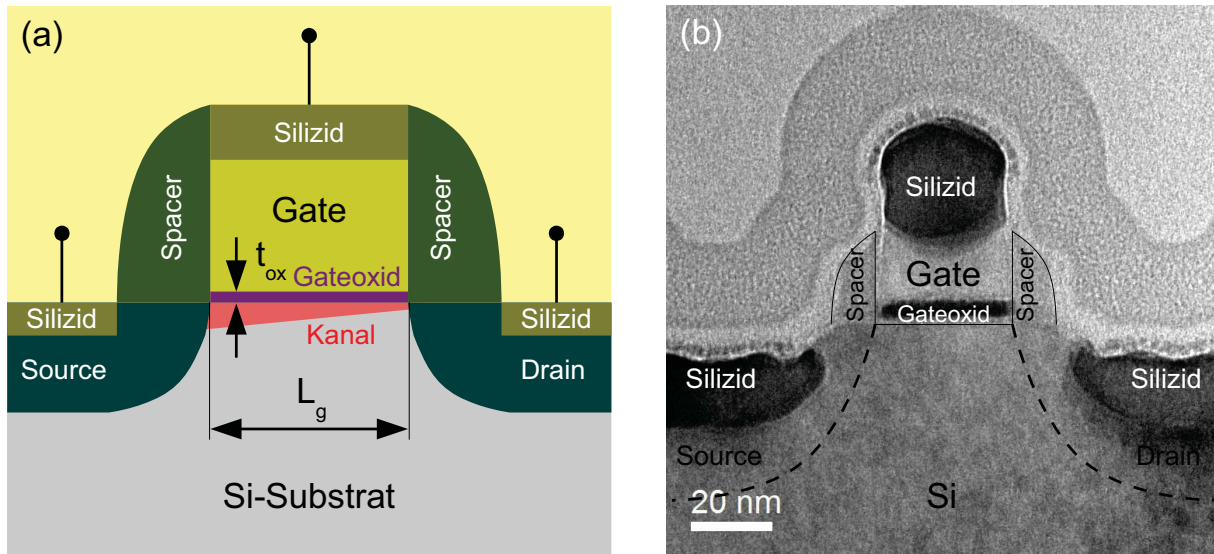


Abbildung 3.1: a) Schematische Darstellung eines MOSFET. b) Hellfeldabbildung eines MOSFET im TEM.

Source/Drain-Widerstand R_{SD} verringert (SZE 2013):

$$\tilde{I}_{D,lin} = \frac{I_{D,lin}}{1 + \frac{R_{SD}}{R_K}}. \quad (3.3)$$

Gleichung (3.1) gilt streng genommen nur für Langkanaltransistoren. Für Transistoren mit Kanallängen von unter 100 nm treten mehrere Effekte auf, die den Drainstrom zusätzlich beeinflussen. Man spricht von Kurzkanaleffekten. Dennoch verdeutlicht Gleichung (3.1), welche Parameter technologisch verändert werden können, um den Drainstrom und damit die Leistungsfähigkeit eines Transistors zu erhöhen. Einer Verringerung der Gatelänge L_G und des Gateoxids t_{ox} stehen schwer kontrollierbare Kurzkanaleffekte, verstärkte Leckströme und Zuverlässigkeitsprobleme gegenüber. Die relative Permittivität des Gateoxids $\epsilon_{r,ox}$ kann durch high- k -Materialien verbessert werden. Die Transistorweite W_G sollte aus Gründen der Bauelementdichte nicht erhöht werden. Der parasitäre Source/Drain-Widerstand sollte gegenüber dem Kanalwiderstand R_K klein gehalten werden, was wegen der stetig schrumpfenden Kanallänge immer schwieriger wird. Betriebs- und Schwellspannung können aufgrund von Beschränkungen der Verlustleistung nicht weiter erhöht bzw. verringert werden. Somit verbleibt einzig die Ladungsträgerbeweglichkeit μ als Optimierungsparameter, um die Leistungsfähigkeit aktueller Transistoren weiter zu erhöhen.

3.2 Techniken zur Spannungserzeugung

In diesem Abschnitt werden zwei Techniken zur Spannungserzeugung in Transistoren vorgestellt. Beide Ansätze verwenden Materialien, die gezielt in der Nähe des Transistorkanals eingebracht werden, entweder in den Source/Drain-Gebieten (Abschnitt 3.2.1) oder in der Verdrahtungsebene (Abschnitt 3.2.2). Dabei erzeugen die beiden Verspannungstechniken aufgrund der verschiedenen Übertragungsmechanismen teilweise stark unterschiedliche Verspannungsfelder im Kanalgebiet, auf die der n- und der p-MOSFET gegensätzlich reagieren.

Generell lassen sich Verspannungstechniken in zwei Gruppen einteilen. Globale Verspannungstechniken erzeugen im gesamten Wafer eine homogene Verspannung, wogegen

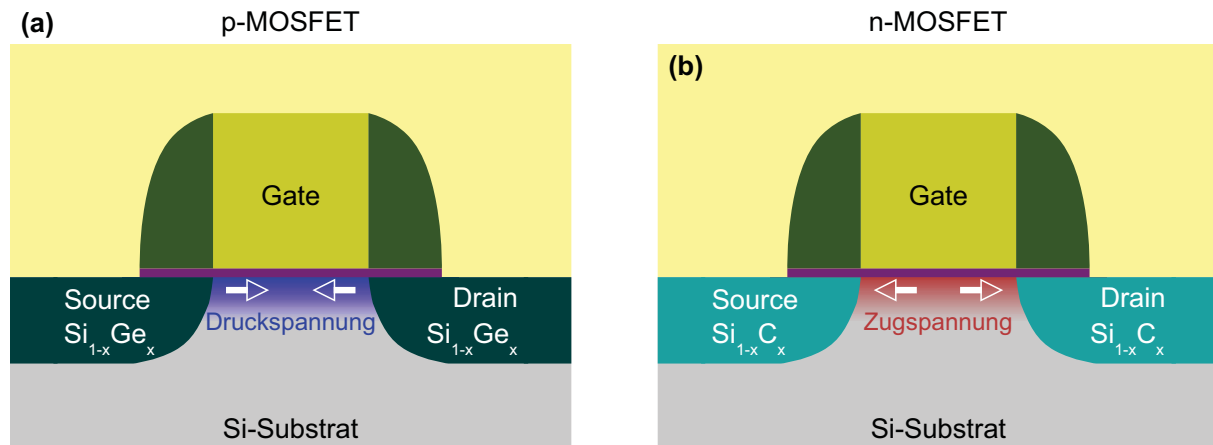


Abbildung 3.2: Erzeugung unterschiedlicher mechanischer Verspannungen im Kanalgebiet eines Transistors durch a) SiGe- und b) Si:C-Source-Drain-Gebiete.

lokale Verspannungstechniken nur in ausgewählten, räumlich begrenzten Regionen des Wafers meist sehr inhomogene Verspannungen hervorrufen. In dieser Arbeit werden mit dem Verfahren der Dunkelfeldholographie nur lokale Verspannungen gemessen.

Eine weitere Unterscheidung der Verspannung bzw. Deformation erfolgt nach der Art der Belastung. Wird ein Körper unter Zug belastet, spricht man von Zugspannung bzw. von Dehnung, gekennzeichnet durch ein positives Vorzeichen. In diesem Fall ist der Abstand zweier benachbarter Atome durch externe Kräfte vergrößert und die Bindungskräfte versuchen die Atome „zueinander zu ziehen“, um so den ursprünglichen Abstand wiederherzustellen. Wird ein Körper unter Druck belastet, spricht man von Druckspannung bzw. von Stauchung, gekennzeichnet durch ein negatives Vorzeichen. Dabei ist das Atomgitter komprimiert und die Bindungskräfte versuchen, die Atome „auseinander zu drücken“, zurück zu ihren Ausgangspositionen.

Weiterhin wird zwischen der uniaxialen und der biaxialen Verspannung oder Deformation unterschieden. Erstere hat nur eine dominante Komponente in einer Raumrichtung, wogegen letztere zwei etwa gleich große dominante Komponenten entlang zweier aufeinander senkrecht stehender Raumrichtungen (d.h. in einer Ebene) aufweist.

3.2.1 SiGe- und Si:C-Source/Drain-Gebiete

Das Herausätzen der Silizium-Source/Drain-Gebiete eines MOSFETs und das epitaktische Wiederauffüllen mit Silizium-Germanium ($\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$, mit x als Germaniumkonzentration, kurz SiGe) wurde erstmals als Verspannungstechnik zur Verbesserung der Leistungsfähigkeit eines p-MOSFETs vorgeschlagen (THOMPSON *et al.* 2002, 2004; GHANI *et al.* 2003). Aufgrund der Epitaxie wird die vom Siliziumkristallgitter vorgegebene Ordnung auf die aufgewachsene SiGe-Schicht übertragen. Kristallines Germanium besitzt gegenüber Silizium eine ca. 4,2% größere Gitterkonstante. Aufgrund der Gitterfehlانpassung zwischen Si und Ge entsteht im SiGe-Film eine intrinsische Druckspannung, die sich als parallele Druckspannung in den Transistorkanal überträgt. Die Ge-Konzentration liegt bei $x = 0.2 \dots 0.3$. Die parallele Druckspannung im Kanalgebiet führt zu einer Erhöhung der Löcherbeweglichkeit. Damit eignet sich eine solche Verspannung nur für den p-MOSFET. Denn beim n-MOSFET führt eine solche Verspannung zu einer Verringerung der Elektronenbeweglichkeit. Somit werden die elektrischen Eigenschaften des n-MOSFETs verschlechtert. Für Transistoren mit Gatelängen von circa 40 nm liegen die Kanalverspannungen im Bereich von -500 MPa bis -900 MPa . Die

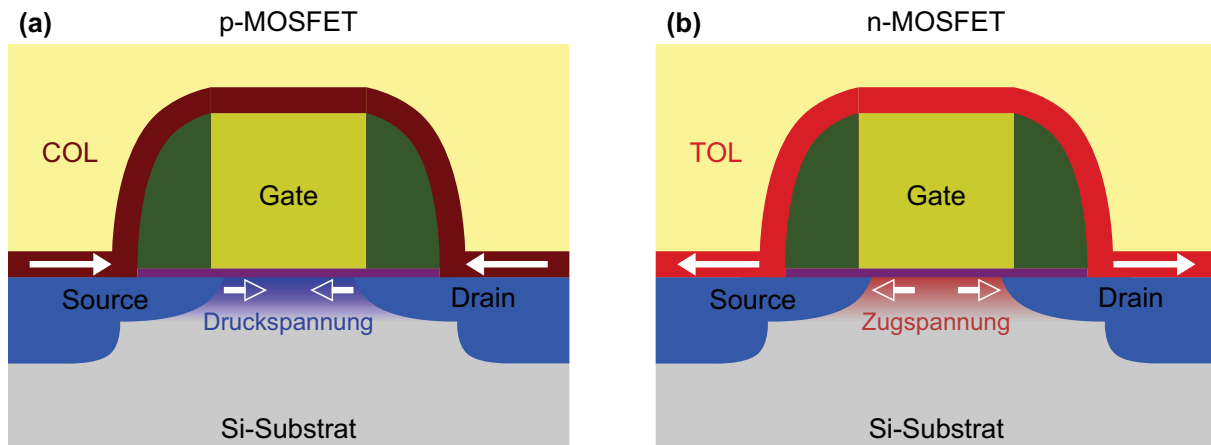


Abbildung 3.3: Erzeugung unterschiedlicher mechanischer Verspannungen im Kanalgebiet eines Transistors durch a) kompressive (COL) und b) tensile (TOL) Deckschichten.

Leistungsfähigkeit des p-MOSFETs lässt sich um 20 % bis 40 % steigern (GHANI *et al.* 2003).

Für den n-MOSFET verwendet man kohlenstoffdotiertes Silizium ($\text{Si}_{1-y}\text{C}_y$ oder Si:C, mit der Kohlenstoffkonzentration y). Aufgrund der kleineren Gitterkonstante von Si:C im Vergleich zu Silizium (Kohlenstoff in der Diamantmodifikation hat eine rund 34 % kleinere Gitterkonstante im Vergleich zu Silizium) entsteht im Kanalgebiet eine parallele Zugverspannung, welche die Elektronenbeweglichkeit im Kanalbereich verbessert. Dabei reichen schon wenige Prozent Kohlenstoff $y = 0,02 \dots 0,03$ in den Si:C-Source/Drain-Gebieten aus, um eine vergleichbare, aber komplementäre Verspannung wie im p-MOSFET mit SiGe-Source/Drain-Gebieten zu erzeugen (ANG *et al.* 2004; CHUI *et al.* 2007). In dieser Arbeit wurden jedoch nur mit SiGe-Source/Drain-Gebieten verspannte Transistoren vermessen.

3.2.2 Verspannte Deckschichten

Die Abscheidung einer intrinsisch verspannten Deckschicht aus Siliziumnitrid stellt eine häufig verwendete Verspannungstechnik in Transistoren dar (Abbildung 3.3). Abhängig von den Prozessbedingungen während der Abscheidung können sowohl zug- als auch druckverspannte Schichten mit mehreren GPa intrinsischer Verspannung erzeugt werden. Die intrinsische Verspannung der Nitridschicht wird über das Gate und die Source/Drain-Gebiete in den Kanalbereich übertragen, wo sich ein komplexes mechanisches Verspannungsfeld ausbildet. Um die Leistungsfähigkeit des n-MOSFET zu erhöhen, nutzt man eine zugverspannte Deckschicht (Tensile Overlay Film, TOL). Diese erzeugt im Transistorkanal eine parallele Zugspannung und eine vertikale Druckspannung. Für den p-MOSFET benötigt man eine druckverspannte Deckschicht (Compressive Overlay Film, COL), welche im Transistorkanal eine parallele Druckspannung und eine vertikale Zugspannung generiert. Bei Verwendung der geeigneten Deckschicht kann die Leistungsfähigkeit von n- bzw. p-MOSFET um bis zu 15 % bzw. 35 % verbessert werden (ITO *et al.* 2000; CHEN *et al.* 2006; PIDIN *et al.* 2004).

3.3 Zusammenhang zwischen mechanischer Verspannung und Ladungsträgerbeweglichkeit

Für die Beschreibung der deformationsbedingten Änderung der Elektronen- und Löcherbeweglichkeit in einem Halbleiterkristall ist noch kein universelles Modell verfügbar. Daher hat sich für die Vorhersage der Beweglichkeitsänderungen von Elektronen und Löchern unter dem Einfluss einer mechanischen Verspannung ein phänomenologischer Ansatz auf Basis experimentell gemessener Piezoelektrischer Koeffizienten entwickelt. Die piezoresistiven Koeffizienten für Silizium wurden zuerst von Smith im Jahre 1954 bestimmt (SMITH 1954).

Der piezoresistive Tensor Π_{ijkl} ist ein Tensor 4. Stufe, der die relative Änderung des spezifischen Widerstandes ($\Delta\rho_{ij}/\rho$) mit dem Verspannungstensor σ_{kl} verknüpft:

$$\frac{1}{\rho}\Delta\rho_{ij} = \sum_{k=1}^3 \sum_{l=1}^3 \Pi_{ijkl}\sigma_{kl} \quad (3.4)$$

Auch hier sind die Zahlen 1,2 und 3 der x -, y - und z -Achse zugeordnet. Wie im Fall des Hooke'schen Gesetzes in der Elastizitätstheorie kann Gleichung (3.4) aus Gründen der Übersichtlichkeit in Matrix-Form geschrieben werden; die Verspannung und der spezifische elektrische Widerstand werden dabei als sechskomponentige Vektoren dargestellt (Voigt-Notation):

$$\frac{1}{\rho} \begin{pmatrix} \Delta\rho_{xx} \\ \Delta\rho_{yy} \\ \Delta\rho_{zz} \\ \Delta\rho_{yz} \\ \Delta\rho_{xz} \\ \Delta\rho_{xy} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Pi_{11} & \Pi_{12} & \Pi_{12} & 0 & 0 & 0 \\ \Pi_{12} & \Pi_{11} & \Pi_{12} & 0 & 0 & 0 \\ \Pi_{12} & \Pi_{12} & \Pi_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \Pi_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \Pi_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \Pi_{44} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{zz} \\ \sigma_{yz} \\ \sigma_{xz} \\ \sigma_{xy} \end{pmatrix}. \quad (3.5)$$

Gleichzeitig kann als Folge der Symmetrieeigenschaften von kristallinem Silizium die Matrix der piezoresistiven Koeffizienten von 81 auf drei unabhängige Koeffizienten reduziert werden. Dies sind Π_{11} , Π_{12} und Π_{44} , welche als der piezoresistive parallele, transversale bzw. Scherkoeffizient bezeichnet werden.

Der spezifische elektrische Widerstand ρ ist mit der Elektronen- und Löcherbeweglichkeit (μ_n und μ_p) wie folgt verknüpft (SZE und NG 2006):

$$\rho = \frac{1}{e(n\mu_n + p\mu_p)}, \quad (3.6)$$

wobei e die Elementarladung und n bzw. p die Elektronen- bzw. Löcherkonzentration bezeichnet. Damit steht eine Änderung des spezifischen elektrischen Widerstands im direkten Zusammenhang zu einer Änderung der Konzentration und der Beweglichkeit der Majoritätsladungsträger. Unter dem piezoresistiven Effekt versteht man im allgemeinen die Änderung des spezifischen elektrischen Widerstandes unter dem Einfluss mechanischer Verspannungen. Mit der Annahme konstanter Ladungsträgerkonzentrationen kann daraus direkt auf die Beweglichkeitsänderung geschlossen werden.

Neben diesem phänomenologischen Ansatz für den Einfluss der mechanischen Verspannung auf die Ladungsträgerbeweglichkeit existiert auch eine quantenmechanische Beschreibung. In der Festkörperphysik werden die Elektronen im Halbleiter durch Elektronenwellen

beschrieben, die sich im periodischen Potential des Kristalls bewegen. Das Potential verändert die Dispersion der Elektronen, was zu der Bildung von Energiebändern und Bandlücken, der sogenannten Bandstruktur führt. Da die Bandstruktur diejenigen Energiezustände im Impulsraum des Kristalls beschreibt, deren Besetzung für Elektronen und Löcher erlaubt oder verboten ist, bestimmt sie die elektronischen und optischen Eigenschaften des Halbleiters.

In diesem Bild werden die Ladungsträger im Silizium als Quasiteilchen aufgefasst und der komplizierte Einfluss der anderen Ladungsträger sowie der Atomrümpfe auf die Bewegung der Ladungsträger innerhalb des Kristalls wird durch eine effektive Masse m^* erfasst. Somit ist es möglich, die Bewegung eines Elektrons im idealen Kristall näherungsweise wie ein freies Teilchen mit dieser effektiven Masse zu beschreiben. Dabei ist die effektive Masse im periodischen Kristall indirekt proportional zur Krümmung des Energiebandes $E(k)$ (Elektronenimpuls $p = \hbar k$) in Richtung des Ladungstransports (ASHCROFT und MERMIN 1976):

$$m^* = \hbar^2 \left(\frac{\partial^2 E(k)}{\partial k^2} \right)^{-1}. \quad (3.7)$$

Gleichzeitig ist nach der klassischen Beschreibung des Ladungsträgertransports mit dem Drude-Modell die Beweglichkeit der Ladungsträger (Elementarladung e) indirekt proportional zur effektiven Masse (ASHCROFT und MERMIN 1976):

$$\mu = \frac{e\tau}{m^*}. \quad (3.8)$$

Dabei wird die Stoßzeit τ durch die Streuung an geladenen und ungeladenen Störstellen im Kristall, thermische Gitterschwingungen (Phononen), Gitterfehlern und Grenzflächeneffekten bestimmt. Folglich bedeutet eine starke Bandkrümmung eine kleine effektive Masse, woraus sich eine große Ladungsträgerbeweglichkeit ergibt. Da verschiedene Materialien eine unterschiedliche Bandstruktur besitzen, unterscheidet sich auch die effektive Masse von Material zu Material. Außerdem ist die Bandstruktur und somit auch die effektive Masse innerhalb eines Kristalls stark richtungsabhängig.

Eine Deformation des Halbleiterkristalls verursacht durch die veränderten Atomabstände eine Veränderung der Bandstruktur und folglich der Ladungsträgerbeweglichkeit. Zur analytischen Beschreibung der energetischen Verschiebung der Bänder bei einer mechanischen Verspannung greift man auf die Deformationspotenzialtheorie zurück, die 1950 von Bardeen und Shockley entwickelt und später durch Herring und Vogt verallgemeinert wurde (BARDEEN und SHOCKLEY 1950; HERRING und VOGT 1956). Die Verschiebung der Leitungs- und Valenzbandkanten wird durch den Verzerrungstensor ε_{ij} und sogenannte Deformationspotenziale, die im wesentlichen Materialkonstanten sind, angeben. Dabei stellt man fest, dass der Einfluss mechanischer Verspannungen auf Valenz- und Leitungsband unterschiedlich ist.

3.4 Zusammenfassung

Dieses Kapitel hat zunächst Aufbau und Funktion des Transistors (MOSFET) vorgestellt; das Objekt, an dem später in dieser Arbeit mechanische Verspannungen gemessen werden. Dabei wurde die Verbesserung der Ladungsträgerbeweglichkeit durch mechanische Verspannungen als wichtige Möglichkeit zur Leistungssteigerung von Transistoren motiviert. Es wurden die Techniken zur Erzeugung mechanischer Spannungen im Kanalbereich eines Transistors erläutert: SiGe-Source/Drain-Gebiete und verspannte Deckschichten. Die Messung der durch diese Techniken erzeugten Verspannungsfelder ist Gegenstand der

späteren Untersuchungen. Um die Notwendigkeit für diese Verspannungsmessung zu motivieren, wurde der Zusammenhang zwischen der mechanischen Spannung und der Ladungsträgerbeweglichkeit skizziert. Die Verspannung wird später die Messgröße in der Dunkelfeldholographie sein. Dagegen ist die Ladungsträgerbeweglichkeit die Größe, die der Ingenieur bei der Entwicklung einer neuen Transistorstruktur benutzt, sei es bei Simulationen oder bei elektrischen Messungen an realen Bauelementen.

4 Beugungswelle und geometrische Phase

Dieses Kapitel bereitet die Grundlage für die später vorgestellte Methode der Dunkelfeld off-axis Elektronenholographie. Zunächst wird das Transmissionselektronenmikroskop (TEM) als experimentelle Apparatur in dieser Arbeit vorgestellt. Die Beschreibung der Elektronen und die Wechselwirkung mit dem Objekt erfolgt im Wellenbild. Treffen die Elektronenwellen auf das periodische Gitter eines Kristalls tritt Beugung auf. Es wird der Begriff der gebeugten Welle eingeführt und die Dunkelfeldabbildung erläutert. Anschließend wird an dem anschaulichen Beispiel des Elementargitters demonstriert, wie die Deformation des Gitters die Phase der Beugungswelle moduliert; man spricht von der geometrischen Phase¹. Zusätzlich zu der phänomenologischen Beschreibung am Beispiel des Elementargitters erfolgt die Ableitung der geometrischen Phase aus der Streuung der Elektronenwelle an dem elektrischen Potential des deformierten Kristalls. Dadurch ergeben sich Aussagen über die Gültigkeit der Beziehung zwischen Deformation und geometrischer Phase.

4.1 Transmissionselektronenmikroskopie

Die Transmissionselektronenmikroskopie stellt in Physik und Materialwissenschaften ein unverzichtbares Analysewerkzeug zur Charakterisierung von Strukturen in Festkörpern dar, insbesondere zur Analyse immer kleiner werdender Halbleiterbauelemente sowie von Gitterdefekten und Korngrenzen in neuen Werkstoffen. Dabei ermöglicht die geringe Wellenlänge der Elektronen eine laterale Auflösung der Strukturen bis in atomare Dimensionen. In der Lichtmikroskopie ist die Auflösungsgrenze durch die numerische Apertur NA des Objektivs und die Wellenlänge des verwendeten Lichts gegeben:

$$d_{min} = 0,61 \frac{\lambda}{NA} = 0,61 \frac{\lambda}{n \sin \alpha}, \quad (4.1)$$

wobei α den halben Öffnungswinkel des Objektivs und n den Brechungsindex vor der Objektivlinse beschreibt. Da die numerische Apertur bei Verwendung von Immersionsöl Werte von $NA = 1,4$ erreicht, kann die Auflösungsgrenze auf die halbe Wellenlänge des beleuchtenden Lichts abgeschätzt werden: $d_{min} = \lambda/2$. Um die Auflösung zu verbessern, bietet es sich an, die Wellenlänge λ zu verkleinern.

Elektronen besitzen sowohl Teilchen- als auch Welleneigenschaften. Nach dem 1924 von Louis de Broglie postulierten Welle-Teilchen Dualismus besitzt ein Elektron mit dem Impuls p die Wellenlänge:

$$\lambda = \frac{h}{p}, \quad (4.2)$$

mit dem Planck'schen Wirkungsquantum h . Die Wellenlänge der Elektronen, die in einem Transmissionselektronenmikroskop durch Beschleunigungsspannungen $U_A \geq 80 \dots 300 \text{ kV}$

¹ Der Begriff der *geometrischen Phase* sollte in diesem Zusammenhang nicht mit der gleichlautenden Bezeichnung für die *Berry Phase* (BERRY 1984) in der Quantenmechanik verwechselt werden.

beschleunigt werden, beträgt:

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m_0eU_A \left(1 + \frac{eU_A}{2m_0c^2}\right)}}, \quad (4.3)$$

mit der Ruhemasse m_0 des Elektrons, seiner Ruheenergie $m_0c^2 = 511 \text{ keV}$ und der Elementarladung e . Somit beträgt für eine Beschleunigungsspannung von $U_A = 200 \text{ kV}$ die Wellenlänge $\lambda = 2,51 \text{ pm}$ und ist damit fünf Größenordnungen kleiner als die des sichtbaren Lichts.

Anfang der 1930er Jahre erfand Ernst Ruska zusammen mit Max Knoll und Bodo von Borries in Berlin das Transmissionselektronenmikroskop, in dem das Objekt mit Elektronen statt mit Licht durchstrahlt wurde (RUSKA und KNOLL 1931; KNOLL und RUSKA 1932). Dabei knüpfte Ruska an Arbeiten von Hans Busch an, der bereits 1926 die fokussierende Wirkung magnetischer Felder auf Elektronenstrahlen beschrieben hatte (BUSCH 1926). Dadurch gelang es Ruska zunächst, eine zweistufige Abbildung des Elektronenstrahls mittels magnetischer Elektronenlinsen zu realisieren. Durch die Erfindung des Polschuhs und den Einsatz zusätzlicher Linsen konnte die Gesamtvergrößerung des Mikroskops deutlich gesteigert werden, so dass die Auflösung des nun mehr dreistufigen, aus Kondensor, Objektiv und Projektiv bestehenden Geräts die Auflösung von Lichtmikroskopen deutlich übertraf (V. BORRIES und RUSKA 1933). 1939 konnte mit dem *Siemens Übermikroskop Ü100* schließlich das erste TEM kommerziell erworben werden. Es wurde mit einer Beschleunigungsspannung von $40 \dots 100 \text{ kV}$ betrieben und erreichte bei 40k-facher Vergrößerung eine Auflösung von 25 nm .

Heute erzielen die besten TEMs bei Beschleunigungsspannungen von $40 \dots 300 \text{ kV}$ leicht eine Auflösung von $0,1 \text{ nm}$, wobei die deutliche Verbesserung in der Auflösung vor allem auf die Entwicklung der Aberrationskorrektur zurückzuführen ist. Denn wie in der Lichtoptik existieren auch in der Elektronenoptik Abbildungsfehler, welche die Auflösung im TEM begrenzen. So erreicht man aufgrund der Abbildungsfehler von magnetischen Elektronenlinsen heute „nur“ eine Auflösung von $0,1 \text{ nm}$, die zwei Größenordnungen oberhalb der Wellenlänge der Elektronen von $\lambda = 2,5 \text{ pm}$ für eine Beschleunigungsspannung von 200 kV liegt.

4.1.1 Aufbau eines Transmissionselektronenmikroskops

Abbildung 4.1 zeigt einen Querschnitt durch ein modernes Transmissionselektronenmikroskop bestehend aus Elektronenquelle und -beschleuniger, Kondensor, Objektiv und Projektiv. Als Elektronenquelle kommt zumeist eine Schottky-Feldemissionsquelle zum Einsatz. Sie besitzt einen hohen Richtstrahlwert $B = 2 \times 10^{12} \text{ A/m}^2\text{sr}$ bei gleichzeitig geringer Energiebreite $\Delta E = 0,3 \dots 0,7 \text{ eV}$. Die emittierten Elektronen werden von einem Beschleuniger auf eine Energie von 200 keV beschleunigt. Die anschließende Kondensoroptik formt aus dem beschleunigten Elektronenstrahl eine gleichmäßige Beleuchtung, um das entsprechend dünn präparierte Objekt in der Objektebene zu durchstrahlen. Das Objekt befindet sich eingebettet in den Probenhalter zwischen den Polschuhen im magnetischen Feld der Objektivlinse. Diese bildet das Objekt in die erste Zwischenbildebene ab. Anschließend wird das Zwischenbild durch ein System aus drei oder vier Zwischen- und Projektivlinsen mit mehr als 10^6 -facher Vergrößerung als Endbild auf einem fluoreszierenden Schirm abgebildet oder mittels einer CCD-Kamera aufgezeichnet.

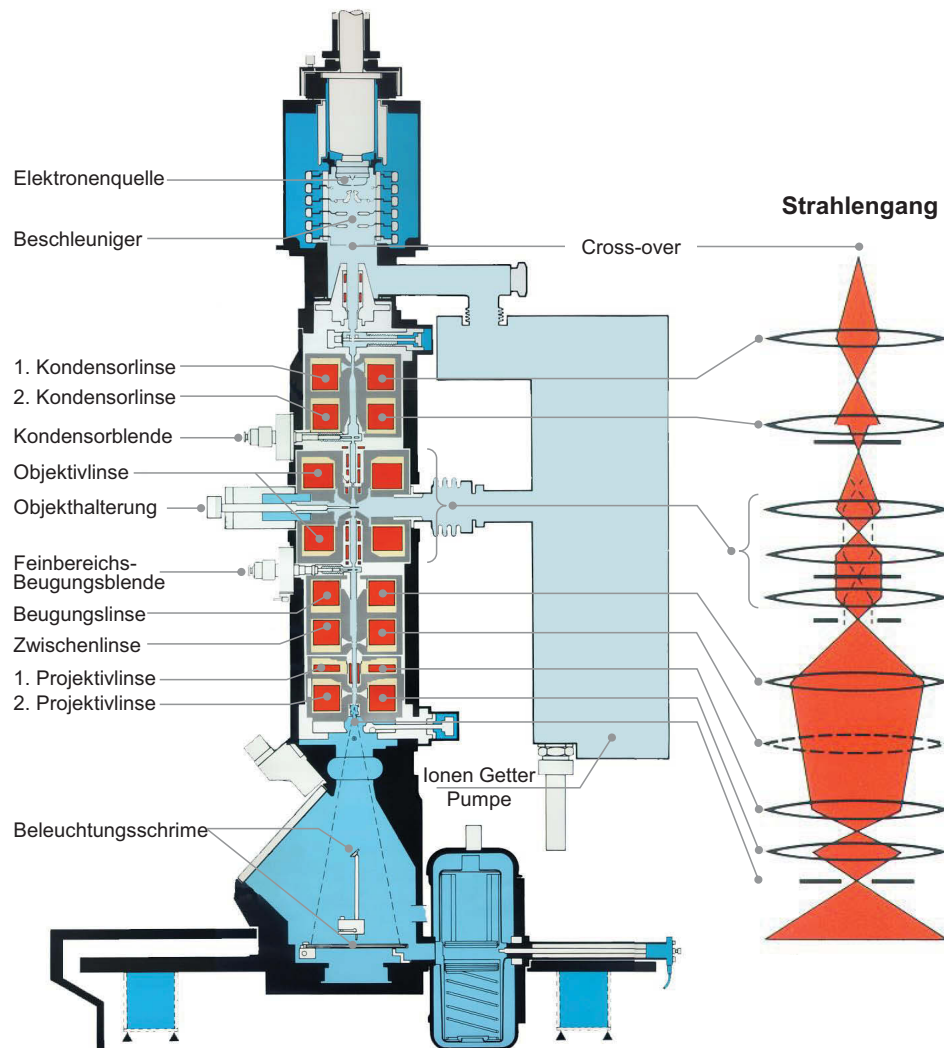


Abbildung 4.1: Schnitt durch ein Transmissionselektronenmikroskop der Philips CM Serie mit Abbildungsstrahlengang für Hellfeldabbildung (Abbildung entnommen LEHMANN (2003), modifiziert).

4.1.2 Hellfeld- und Dunkelfeldabbildung

Eine besondere Stärke der Transmissionselektronenmikroskopie liegt in der Erzeugung und Abbildung von Beugungskontrasten. Bei einer kristallinen Probe werden die einfallenden Elektronenwellen an den Netzebenen des Kristalls gebeugt. Ein TEM erlaubt es, zwischen dem Abbildungsmodus und dem Beugungsmodus umzuschalten. In beiden Modi werden die Elektronen zunächst von der Objektivlinse fokussiert: Elektronen die im Kristall an der selben Netzebene, d.h. um den selben Winkel, gebeugt wurden, werden in der hinteren Brennebene der Objektivlinse in den selben Punkt fokussiert. Hier entsteht das Beugungsbild des Kristalls; es entspricht einem Schnitt durch die Fouriertransformierte des Realraumgitters. In der Zwischenbildebene entsteht schließlich das Abbild des Kristalls, das im Abbildungsmodus durch die Projektive vergrößert in die Detektorebene abgebildet wird. Um das Beugungsbild sichtbar zu machen, wird in den Beugungsmodus geschaltet. Dazu wird die Anregung der ersten Zwischenlinse (Beugungslinse) derart verringert, dass die hintere Brennebene mit der Detektorebene konjugiert wird. So kann die hintere Brennebene mit dem Beugungsbild vergrößert in die Detektorebene abgebildet werden.

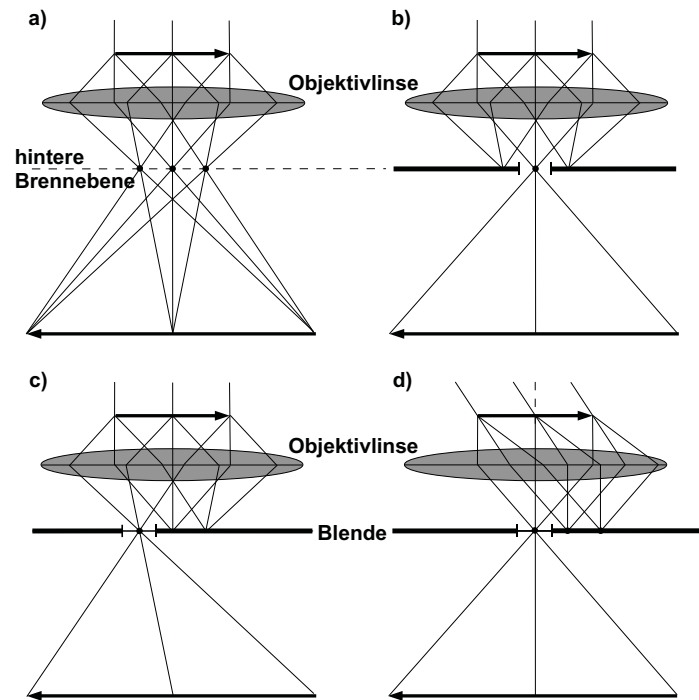


Abbildung 4.2: Abbildungsmodi im TEM. a) Standardabbildung ohne Blende. b) Hellfeldabbildung. c) Dunkelfeldabbildung durch Verschieben der Blende. d) Dunkelfeldabbildung durch Kippen der Beleuchtung.

Blenden in der hinteren Brennebene der Objektivlinse erlauben es, bestimmte Bereiche aus dem Beugungsbild auszuschneiden (Abb. 4.2). Im Abbildungsmodus tragen dann nur noch die Elektronen zum Bild bei, die an den ausgewählten Netzebenen gebeugt wurden. Dies bildet die Grundlage für die Abbildung von Beugungskontrasten. Gewöhnlich benutzt man dazu eine Zweistrahlbedingung. Dabei wird der Kristall so verkippt, dass sich nur noch eine bestimmte Netzebene in Beugungsbedingung befindet. Dann sind im Beugungsbild nur noch zwei Strahlen zu erkennen: Der ungebeugte Strahl (Nullstrahl) und der abgebeugte Strahl. Mit der Objektblende kann nun jeweils einer der beiden Strahlen ausgewählt werden. Wird wie in Abb. 4.2b der ungebeugte Strahl mit einer zentrierten Blende ausgewählt spricht man von Hellfeldabbildung. Dagegen spricht man von Dunkelfeldabbildung wenn mit der Blende der abgebeugte Strahl ausgewählt wird. Das Ausschneiden des abgebeugten Strahls kann durch Verschieben der Blende (Abb. 4.2c) oder durch Kippung der Beleuchtung (Abb. 4.2d) erfolgen. Das Kippen der Beleuchtung bietet den Vorteil, dass der abgebeugte Strahl auf der optischen Achse liegt. Weil dadurch die abbildenden Strahlen achsenparallel sind, werden Abbildungsfehler minimiert. Unter Vernachlässigung von dynamischen Beugungseffekten, können die Beugungskontraste im Hell- und Dunkelfeld wie folgt erklärt werden: Dunkle Bereiche in der Hellfeldabbildung und helle Bereiche in der Dunkelfeldabbildung repräsentieren Objektstellen, in denen mehr Elektronen gebeugt werden, d.h. an denen die Netzebenen die zuvor eingestellte Beugungsbedingung besser erfüllen.

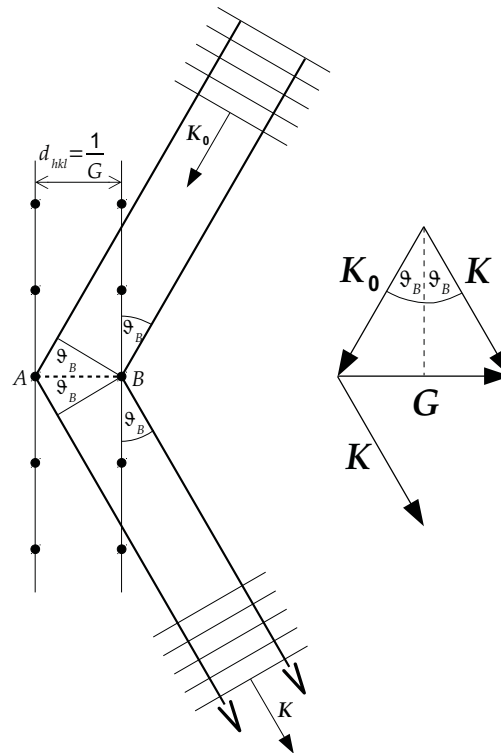


Abbildung 4.3: Geometrische Veranschaulichung der Bragg-Bedingung am Realraumgitter (links) und der äquivalenten Laue-Bedingung mittels der Gittervektoren im reziproken Raum (rechts).

4.2 Beugung am Kristallgitter

4.2.1 Bragg- und Laue-Beugungsbedingung

Die Beugung der Elektronen am Kristallgitter wird zunächst im Rahmen der kinematischen Beugungstheorie betrachtet. Sie lässt sich als Reflexion an den Scharen paralleler Netzebenen veranschaulichen (Abb. 4.3). Wenn eine Elektronenwelle der Wellenlänge λ auf eine Netzebenenschar (hkl) trifft, wird ein Teil der einfallenden Elektronenwelle an der Netzebenenschar reflektiert und ein anderer Teil transmittiert. Nach dem Reflexionsgesetz von Snellius besitzen Ein- und Ausfallswinkel dabei den gleichen Betrag ². Da Reflexion und Transmission nicht nur an der ersten Netzebene stattfinden, sondern auch an der zweiten, dritten und allen nachfolgenden Netzebenen, hat die an der zweiten Netzebene reflektierte Welle einen längeren optischen Weg zurückzulegen als die an der ersten Netzebene reflektierte Welle. Die reflektierten Wellen interferieren konstruktiv, wenn die optische Wegdifferenz zwischen den Wellenzügen, die an den unterschiedlichen Ebenen der Schar reflektiert werden, ein ganzzahliges Vielfaches n der Wellenlänge λ betragen. Mit Abb. 4.3 erhält man daraus die Bragg-Bedingung für die konstruktive Interferenz der an der Netzebenenschar (hkl) reflektierten Elektronen (BRAGG 1913):

$$2d_{hkl} \sin \vartheta_B = n\lambda. \quad (4.4)$$

Darin bezeichnet $d_{hkl} = 1/G$ den Netzebenenabstand, ϑ_B den Bragg-Winkel zwischen dem Wellenvektor K_0 der einfallenden, ebenen Welle und der Netzebenenschar, $\lambda = 1/|K_0|$ die

² Anders als in der Lichtoptik wird der Reflexionswinkel nicht zur Netzebenennormale, sondern zur Netzebene gemessen.

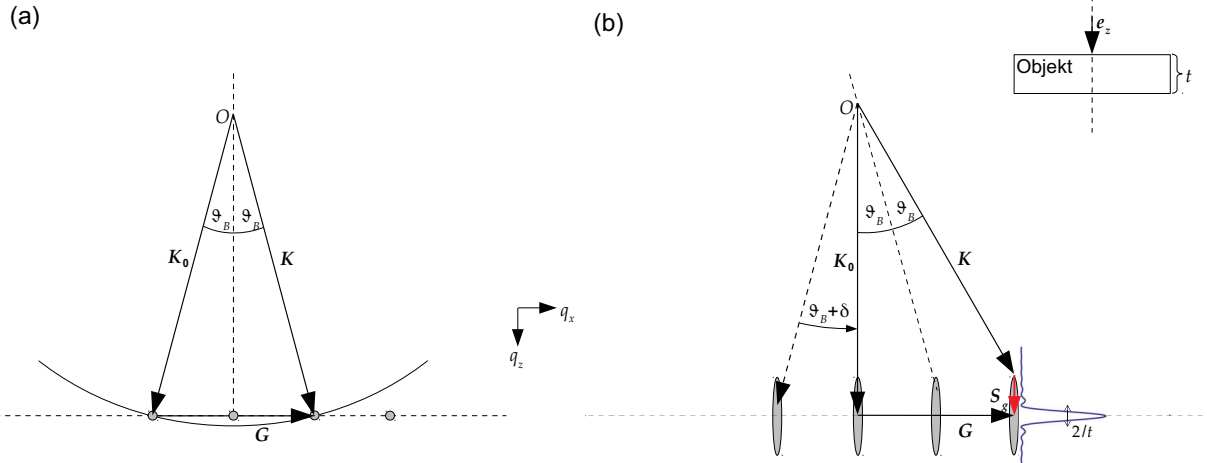


Abbildung 4.4: Ewald-Konstruktion im reziproken Raum: a) Scheidet die Ewaldkugel einen reziproken Gitterpunkt, erfüllen der Vektor K_0 des einfallenden Strahls, der Vektor K des gebeugten Strahls und der reziproke Gittervektor G die Bragg-Bedingung. b) Im realen Kristall sind Gitterpunkte zu Stäben entartet. Beugung tritt auf, sobald die Ewaldkugel einen Gitterstab schneidet. Der Anregungsfehler S_g beschreibt die Abweichung von der idealen Bragg-Bedingung. Sie lässt sich durch Kippung des einfallenden Strahls um den Winkel δ variieren.

Elektronenwellenlänge und n eine ganze Zahl, welche die Beugungsordnung zählt.

Die Bragg-Bedingung beschreibt die Beugung der Elektronenwelle im Realraumgitter. Das Äquivalent zur Bragg-Bedingung stellt im reziproken Gitter die Laue-Bedingung dar:

$$G = K - K_0, \quad (4.5)$$

mit dem reziproken Gittervektor G , dem Wellenvektor K_0 der einfallenden Welle und dem Wellenvektor K der reflektierten Welle. Dabei wird davon ausgegangen, dass die Wellenlänge der Elektronen bei Reflexion an den Netzebenen unverändert bleibt. Somit besitzen der Wellenvektor von einfallender und reflektierter Welle den selben Betrag: $|K_0| = |K|$. Wie Abb. 4.3 verdeutlicht bilden die Vektoren K_0 , K und G ein gleichschenkliges Dreieck, mit dem Bragg-Winkel $2\vartheta_B$ zwischen K_0 und K . In dem Dreieck gilt: $G/2 = k \sin \vartheta_B$, was wegen $G = 1/d_{hkl}$ und $K = 1/\lambda$ der Bragg-Bedingung im Realraum entspricht. Die Laue-Bedingung besagt, dass die reflektierten Wellen genau dann konstruktiv interferieren, wenn der Differenzvektor zwischen dem Wellenvektor K_0 der einfallenden Welle und dem Wellenvektor K der reflektierten Welle ein ganzzahliges Vielfaches n des reziproken Gittervektors G ist.

4.2.2 Ewaldkugel

Die Beugung der Elektronenwelle kann mit Hilfe der Ewald-Konstruktion in Abbildung 4.4a veranschaulicht werden. Gezeigt ist ein Schnitt durch das reziproke Gitter. Der Angriffspunkt des Wellenvektors K_0 definiert den Ursprung der Ewald-Kugel. Sie beschreibt einen Kreis mit dem Radius $|K_0|$. Der Punkt, auf den die Spitze von K_0 zeigt, entspricht im Beugungsbild dem ungebeugten Strahl (Nullstrahl). Der Wellenvektor der gebeugten Welle K besitzt den gleichen Betrag $|K| = |K_0|$ wie der Wellenvektor der ungebeugten Welle K_0 . Nur wenn die Wellenvektoren K_0 und K auf unterschiedliche reziproke Gitterpunkte zeigen, entspricht der Vektor zwischen diesen beiden Gitterpunkten einem reziproken Gittervektor G , so dass die Laue-Bedingung (4.5) erfüllt wird. Dann wird die einfallende Welle an der Netzebene mit dem Netzebenenabstand $G = 1/d_{hkl}$ gebeugt

und es tritt im Beugungsbild ein gebeugter Strahl auf.

Bei einem dünnen Kristall beobachtet man auch dann noch gebeugte Strahlen, obwohl die Bragg-Bedingung nicht exakt erfüllt wird, also der reziproke Gittervektor nicht auf der Ewald-Kugel liegt. Aufgrund der endlichen Ausdehnung von realen kristallinen Objekten, werden die Gitterpunkte mit einer Gestaltsfunktion (*shape function*) gefaltet, welche die äußere Form des Kristalls beschreibt. In Abbildung 4.4 wird dies dadurch verdeutlicht, dass aus den Gitterpunkten Gitterstäbe oder -linien entlang der q_z -Richtung werden. So tritt ein Beugungsreflex immer dann auf, wenn die Ewald-Kugel einen Gitterstab schneidet. Der Vektor S_G heißt Anregungsfehler und gibt die Abweichung von der exakten Bragg-Bedingung an. Der Betrag von S_G kann aus Abbildung 4.4b abgeleitet werden (DE GRAEF 2003):

$$S_G = -\frac{G^2 + 2\mathbf{K}_0 \cdot \mathbf{G}}{2|\mathbf{K}_0|}. \quad (4.6)$$

Der Anregungsfehler ist ein experimentell zugänglicher Parameter. Denn wie Abbildung 4.4b veranschaulicht, lässt er sich durch eine Kippung des einfallenden Wellenvektors \mathbf{K}_0 um den Winkel δ variieren. Da die Intensität eines Beugungsreflexes unter anderem auch vom Anregungsfehler abhängt, kann man im TEM eine Beleuchtungskippung dazu benutzen, die Intensität in einem Beugungsreflex zu optimieren.

4.2.3 Beugungswelle

Die an einer Netzebenenschar mit dem Netzebenenabstand $d_{hkl} = 1/G$ gebeugte Welle wird Beugungswelle genannt. Sie besitzt die Wellenfunktion:

$$\psi_G(\mathbf{R}) = \tilde{\psi}_G e^{i2\pi\mathbf{K} \cdot \mathbf{R}} = \tilde{\psi}_G e^{i2\pi(\mathbf{K}_0 + \mathbf{G}) \cdot \mathbf{R}}. \quad (4.7)$$

mit der Amplitude $\tilde{\psi}_G$ und der Phase $\varphi_G(\mathbf{R}) = 2\pi(\mathbf{K}_0 + \mathbf{G}) \cdot \mathbf{R}$. Dabei wurde der Wellenvektor \mathbf{K} der Beugungswelle mit Hilfe der Laue-Bedingung (4.5) durch den Wellenvektor \mathbf{K}_0 der einfallenden Welle und den reziproken Gittervektor \mathbf{G} ausgedrückt. Für $G = 0$ ergibt sich die Wellenfunktion der ungebeugten Welle:

$$\psi_0(\mathbf{R}) = \tilde{\psi}_0 e^{i2\pi\mathbf{K}_0 \cdot \mathbf{R}}, \quad (4.8)$$

mit der Amplitude $\tilde{\psi}_0$ und der Phase $\varphi_0(\mathbf{R}) = 2\pi\mathbf{K}_0 \cdot \mathbf{R}$.

Die Laue-Bedingung (4.5) besagt, dass die einfallende Elektronenwelle nur in Richtungen $\mathbf{K} = \mathbf{K}_0 - \mathbf{G}$ gebeugt wird, für die der reziproke Gittervektor \mathbf{G} auf den Rand der Ewald-Kugel zeigt. Da diese Bedingung für viele verschiedene reziproke Gittervektoren \mathbf{G} erfüllt ist, darf man sich die Objektaustrittswelle an der Austrittsfläche des Kristalls als Überlagerung von ebenen Beugungswellen vorstellen, die sich in die unterschiedlichen Richtungen \mathbf{K} ausbreiten:

$$\psi(\mathbf{R}) = \sum_{\mathbf{G}} \psi_G(\mathbf{R}) = e^{i2\pi\mathbf{K}_0 \cdot \mathbf{R}} \sum_{\mathbf{G}} \tilde{\psi}_G e^{i2\pi\mathbf{G} \cdot \mathbf{R}}. \quad (4.9)$$

Die lineare Superposition der Beugungswellen in Gleichung (4.9) entspricht dabei einer Fourierentwicklung der Objektaustrittswelle $\psi(\mathbf{R})$ nach den Beugungswellen $\psi_G(\mathbf{R})$.

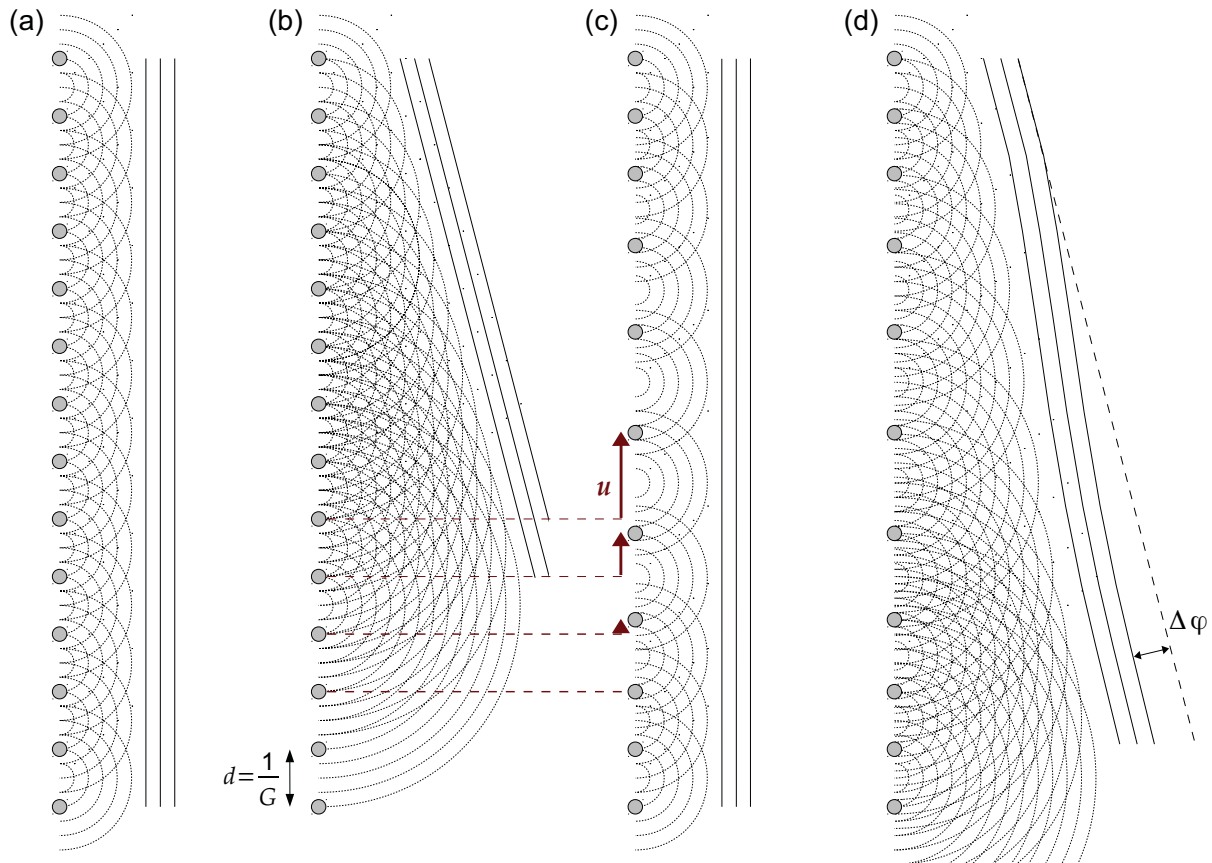


Abbildung 4.5: Konstruktion von Beugungswellen nach dem Hygen'schen Prinzip: a) Ungebeugte Welle am undeformierten Gitter. b) Beugungswelle am undeformierten Gitter. c) Ungebeugte Welle an dem aufgeweiteten Gitter. d) Beugungswelle an dem aufgeweiteten Gitter. Es tritt eine Verbiegung $\Delta\varphi$ der Wellenfronten im Vergleich zu b) auf. Die Aufweitung wird durch die Verschiebung u beschrieben.

4.3 Geometrische Phase

4.3.1 Geometrische Phase in kinematischer Näherung

In Abschnitt 4.2 wurde die Beugungswelle aus einer rein geometrischen Betrachtung der Streuung abgeleitet. Dabei wurde davon ausgegangen, dass die einfallende Welle nur einfach an den Netzebenen des Kristalls gestreut wird. Somit verlässt die gestreute Welle von jedem beliebigen Ort den Kristall, ohne ein weiteres Mal gestreut zu werden. Diese vereinfachte Vorstellung entspricht der kinematischen Theorie der Beugung (*Born'schen Näherung*). Sie soll im folgenden Abschnitt als Grundlage für die Definition der geometrischen Phase dienen.

Die Phase der Beugungswelle (4.7): $\varphi_G(\mathbf{R}) = 2\pi(\mathbf{K}_0 + \mathbf{G}) \cdot \mathbf{R}$ hängt von Betrag und Richtung des reziproken Gittervektors \mathbf{G} der beugenden Netzebenenschar ab. Dieser wiederum bestimmt sich durch die Anordnung der Atome im Kristallgitter. Wie sieht nun die Beugungswelle für ein deformiertes Gitter aus?

Abbildung 4.5 hilft, zunächst eine phänomenologische Erklärung anhand des Hygen'schen Prinzips zu formulieren. Dazu wird die Beugung einer einfallenden ebenen Welle an einem eindimensionalen Punktgitter betrachtet. Das Gitter in den Abbildungen 4.5a und 4.5b besitzt eine feste Gitterkonstante $d = 1/G$. Dagegen ist das in den Abbildungen 4.5c und 4.5d gezeigte Gitter in der Mitte aufgeweitet; nur an den beiden Rändern stimmen alle vier Gitter

überein. Dabei wird die Aufweitung des deformierten Gitters durch die Verschiebung \mathbf{u} der Gitterpunkte des undeformierten Gitters erreicht. Nach dem Hygen'schen Prinzip kann jeder Punkt zwischen den Gitterpunkten als Ausgangspunkt einer neuen Elementarwelle aufgefasst werden. In Abbildung 4.5 sind nur die Elementarwellen eingezeichnet, die ihren Ausgangspunkt jeweils in der Mitte zwischen zwei Gitterpunkten haben. Die Wellenfronten hinter dem Gitter ergeben sich aus der Überlagerung der Elementarwellen. Abbildung 4.5a zeigt die ungebeugte Welle und Abbildung 4.5b irgendeine Beugungswelle an dem idealen undeformierten Gitter. Dagegen illustrieren die Abbildungen 4.5c und 4.5d die Ausbreitung der ungebeugten sowie der gebeugten Welle am deformierten Gitter. Während die Wellenfronten der ungebeugten Welle an dem undeformierten und dem deformierten Gitter identisch sind, tritt bei den Wellenfronten der Beugungswelle an dem deformierten Gitter eine Verbiegung auf, was gleichbedeutend mit einer Phasenmodulation der Beugungswelle ist. Offensichtlich ist die Verschiebung der Gitterpunkte im deformierten Gitter der Grund für die Verbiegung der Wellenfront, weil sich dadurch auch die Ausgangspunkte der Elementarwellen zwischen den Gitterpunkten mit verschoben haben.

An einem deformierten Kristall kann man wie folgt argumentieren: In Gleichung (4.9) wurde die Objektaustrittswelle $\psi(\mathbf{R})$ am undeformierten Kristallgitter als Fourierentwicklung nach den Beugungswellen $\psi_G(\mathbf{R})$ geschrieben:

$$\psi(\mathbf{R}) = \sum_{\mathbf{G}} \psi_G(\mathbf{R}) = e^{i2\pi\mathbf{K}_0 \cdot \mathbf{R}} \sum_{\mathbf{G}} \tilde{\psi}_G e^{i2\pi\mathbf{G} \cdot \mathbf{R}}. \quad (4.10)$$

In Abschnitt 2.1 wurde erläutert, dass die durch eine Deformation verursachte Verschiebung der Gitterpunkte im Realraumgitter mit Hilfe des Verschiebungsvektors \mathbf{u} ausgedrückt werden kann. Ein Gitterpunkt, der sich im undeformierten Gitter am Ort \mathbf{R} befindet, wird im deformierten Gitter an den Ort $\mathbf{R}' = \mathbf{R} - \mathbf{u}$ verschoben. Für eine in Betrag und Richtung konstante Verschiebung gilt der Verschiebungssatz der Fouriertransformation, der besagt, dass eine Verschiebung \mathbf{u} im Realraumgitter zu einer Phase im reziproken Gitter führt (CHAMPENEY 1973). Demnach muss die Objektaustrittswelle des verschobenen Kristalls die Gestalt

$$\psi(\mathbf{R}) = e^{i2\pi\mathbf{K}_0 \cdot \mathbf{R}} \sum_{\mathbf{G}} \tilde{\psi}_G e^{i2\pi\mathbf{G} \cdot (\mathbf{R} - \mathbf{u})} \quad (4.11)$$

besitzen. In der Fourierentwicklung nach den Beugungswellen steht nun die zusätzliche Phase

$$\varphi_g(\mathbf{R}) = 2\pi\mathbf{G} \cdot \mathbf{u}, \quad (4.12)$$

die für jede Beugungswelle ψ_G die Verschiebung \mathbf{u} der Gitterpunkte, also ihre geänderte geometrische Anordnung, berücksichtigt. Deshalb nennt man die Phase (4.12) geometrische Phase. Dieser Begriff wurde von Martin Hÿtch im Zusammenhang mit der Analyse deformierter Kristallgitter aus den Fouriertransformierten hochaufgelöster TEM-Aufnahmen, der sogenannten Geometrischen Phasenanalyse, geprägt (HÛTCH *et al.* 1998). Strenggenommen ist diese Argumentation nur für eine konstante Verschiebung \mathbf{u} zulässig. In HÛTCH und PLAMANN (2001) wird sie einfach auf die ortsabhängige Verschiebung $\mathbf{u}(\mathbf{R})$ übertragen. In wieweit diese Näherung gültig ist, wird nicht weiter diskutiert. Tatsächlich darf man den Translationsvektor \mathbf{u} durch die ortsabhängige Verschiebung $\mathbf{u}(\mathbf{R})$ nur ersetzen, solange sich die Verschiebung $\mathbf{u}(\mathbf{R})$ nur wenig über die Länge der Gitterkonstanten $d = 1/G_0$ des undeformierten Gitters ändert (LUBK *et al.* 2014):

$$\frac{|\Delta \mathbf{u}|}{d} = \frac{|\mathbf{u}(d) - \mathbf{u}(0)|}{d} \ll 1, \quad (4.13)$$

g_0/p_x	a	b/p_x^{-1}	x_1/p_x	x_2/p_x
1/32	0,01	256	2496	5696

Tabelle 4.1: Parametersatz zur Modellierung des deformierten Kosinusgitters.

mit $u(0)$ der Verschiebung am Ursprung der Elementarzelle des Gitters und $u(d)$ der Verschiebung nach einer Gitterkonstanten. Bedingung 4.13 wird in Abschnitt 4.3.3 am Beispiel des Elementargitters ausführlich diskutiert. Zuvor jedoch soll die geometrische Phase am Elementargitter veranschaulicht werden.

4.3.2 Veranschaulichung der geometrischen Phase am Elementargitter

Um die Zusammenhänge zwischen geometrischer Phase, Verschiebung und Deformation zu veranschaulichen, soll ein kosinusförmiges Amplitudengitter betrachtet werden. Da jedes periodische Objekt in eine Fourierreihe bestehend aus Kosinus- und Sinusfunktionen entwickelt werden kann, stellt es ein ideales Testobjekt dar. Es soll nur der eindimensionale Fall betrachtet werden.

Das unendlich ausgedehnte Kosinusgitter mit konstantem Untergrund und der Gitterkonstanten $d_0 = 1/g_0$ besitzt die Objektwellenfunktion:

$$\psi_0(x) = 1 + \cos[2\pi g_0 x]. \quad (4.14)$$

Dagegen besitzt das deformierte Kosinusgitter die Objektwellenfunktion:

$$\psi_d(x) = 1 + \cos[2\pi g_0(x - u(x))], \quad (4.15)$$

wobei im Argument des Kosinus laut Abschnitt 2.1 die Ersetzung $x \rightarrow (x - u(x))$ mit der Verschiebung $u(x)$ vorgenommen wurde.

Für die weitere Betrachtung muss eine konkrete Modellfunktion für die Verschiebung $u(x)$ angenommen werden. Dazu wird zunächst ein Modell für die Deformation $\varepsilon(x)$ angegeben:

$$\varepsilon(x) = -\frac{a}{\exp[(x - x_1)/b] + 1} + \frac{a}{\exp[(x - x_2)/b] + 1}, \quad (4.16)$$

wobei die Konstanten a , b , x_1 und x_2 in Tabelle 4.1 zusammengefasst sind. Der Parameter a bestimmt die Stärke der Gitterverzerrung; b beschreibt die Breite der Übergangsbereiche zwischen den undeformierten Teilen und dem deformierten Teil des Gitters. Die Positionen x_1 und x_2 geben jeweils die Mitte dieser Übergangsbereiche an.

Die Deformation $\varepsilon(x)$ des Gitters ergibt sich nach Abschnitt 2.1 aus der Ableitung der Verschiebung $u(x)$. Also kann nun umgekehrt die Verschiebung durch Integration aus dem Modell für die Deformation $\varepsilon(x)$ erhalten werden:

$$u(x) = \int_0^x \varepsilon(\xi) d\xi = a b \ln \left[\frac{1}{\exp[-(x - x_1)/b] + 1} \right] - a b \ln \left[\frac{1}{\exp[-(x - x_2)/b] + 1} \right]. \quad (4.17)$$

Die reziproke Gitterkonstante beträgt $g_0 = 1/(32 \text{ px})$. Die weitere Auswertung der Objektwellenfunktionen erfolgt mit *DigitalMicrograph*, einem Programm für die digitale Bildverarbeitung. Dabei werden die Wellenfunktionen in dem Pixelintervall $[0, 8192]$ betrachtet. Dies stellt sicher, dass eine ausreichende Abtastung des Kosinus durch die zur Verfügung stehenden Pixel gewährleistet wird. Mit der Wahl der übrigen Parameter

in Tabelle 4.1 ergibt sich ein Kosinusgitter, das eine Aufweitung zwischen den Pixeln $x_1 = 2496$ und $x_2 = 5696$ erfährt. Dies stellt sicher, dass das Gitter in den undeformierten Bereichen rechts und links vom deformierten Bereich kommensurabel zu dem vollständig undeformierten Referenzgitter ist. Die Maximale Dehnung $a = 0,1$ wird an $x = 4096$ erreicht. Abbildung 4.6a zeigt die Aufweitung des Kosinusgitters durch die Verschiebung $u(x)$ in dem Teilintervall $[2304, 3328]$. Man beobachtet eine ortsabhängige Verschiebung der Gitterpunkte des undeformierten Gitters auf die neuen Positionen des deformierten Gitters.

Die Abbildung der Objektwellen für das deformierte und undeformierte Kosinusgitter durch die (ideale) Objektlinse erfolgt nach der Abbe'schen Abbildungstheorie. In der hinteren Brennebene der Objektlinse erhält man das Spektrum der Objektwelle. Für das undeformierte Gitter lautet das Spektrum:

$$\tilde{\psi}_0(g) = \mathcal{FT}\{\psi_0(x)\} = \delta(g) + \frac{1}{2}\delta(g + g_0) + \frac{1}{2}\delta(g - g_0), \quad (4.18)$$

und für das deformierte Gitter:

$$\begin{aligned} \tilde{\psi}_d(g) &= \mathcal{FT}\{\psi_d(x)\} \\ &= \delta(g) + \frac{1}{2}\delta(g + g_0) \otimes \mathcal{FT}\left[e^{i2\pi g_0 u(x)}\right] + \frac{1}{2}\delta(g - g_0) \otimes \mathcal{FT}\left[e^{-i2\pi g_0 u(x)}\right]. \end{aligned} \quad (4.19)$$

Wie Abbildung 4.6b illustriert, bestehen die Spektren jeweils aus drei Reflexen. Der zentrale Reflex $\delta(g)$ entspricht der ungebeugten Welle. Die Reflexe bei $\delta(g \pm g_0)$ repräsentieren die konjugiert komplexen Beugungswellen. Im Gegensatz zum Spektrum des undeformierten Kosinusgitters sind im Spektrum des deformierten Kosinusgitters die Reflexe bei $\delta(g \pm g_0)$ mit der Fouriertransformierten des ortsabhängigen Phasenfaktors $\exp[\pm i2\pi g_0 u(x)]$ gefaltet. Deshalb beobachtet man in Abbildung 4.6b eine „Ausschmierung“ der Beugungsreflexe des deformierten Kosinusgitters, die wie folgt erklärt werden kann: Im Realraumgitter verursacht die Modulation des Kosinusgitters durch die Verschiebung $u(x)$ eine ortsabhängige Änderung der Gitterkonstante; d.h. die Gitterkonstante ist nicht mehr konstant, sondern der Abstand der Gitterpunkte ändert sich kontinuierlich, proportional zur Verschiebung $u(x)$. Also liegt für das aufgeweitete Gitter eine Verteilung von „Gitterkonstanten“ im Bereich $a_0 \leq a \leq a_{max}$ zwischen der Gitterkonstanten a_0 des ursprünglichen, undeformierten Gitters und der größten im aufgeweiteten Gitter auftretenden Gitterkonstanten a_{max} vor. Im reziproken Raum entspricht dies der in Abbildung 4.6c beobachteten Verteilung von Raumfrequenzen um $g_0 = 0,03125 \text{ 1/px}$. Diese Verteilung ist unsymmetrisch; sie besitzt mehr Raumfrequenzanteile $g \leq g_0$ als $g \geq g_0$, weil eine Aufweitung des Gitters vorliegt. Dagegen wäre der Beugungsreflex im Fall einer Kompression des Gitters stärker zu höheren Raumfrequenzen „ausgeschmirt“, würde also mehr Raumfrequenzanteile $g \geq g_0$ als $g \leq g_0$ besitzen. Im vorliegenden Modell kann mit $\varepsilon = (a - a_0)/a_0 = (g_0 - g)/g$ für die maximale Aufweitung $\varepsilon = +0.1$ eine minimale Raumfrequenz $g_{min} = 0,0284 \text{ 1/px}$ geschätzt werden. Jedoch tritt diese im „ausgeschmerten“ Beugungsreflex nicht signifikant in Erscheinung. Ebenso lassen sich einige Raumfrequenzanteile $g \geq g_0$ beobachten, welche man für eine reine Aufweitung des Gitters mit $a_0 \leq a \leq a_{max}$ im Spektrum nicht erwarten würde. Hierin zeigt sich, dass das Spektrum nicht einfach eine kontinuierliche Verteilung von Raumfrequenzen $g_{min} \leq g \leq g_0$ darstellt; aufgrund der ortsabhängigen Verschiebung $u(x)$ in der Phase der Objektwelle, ergibt sich die Verteilung der Raumfrequenzanteile in der Beugungswelle auf komplizierte Weise durch die oben beschriebene Faltung.

Um die komplexe Beugungswelle ψ_{+g_0} mit dem positiven Vorzeichen zu isolieren, wird

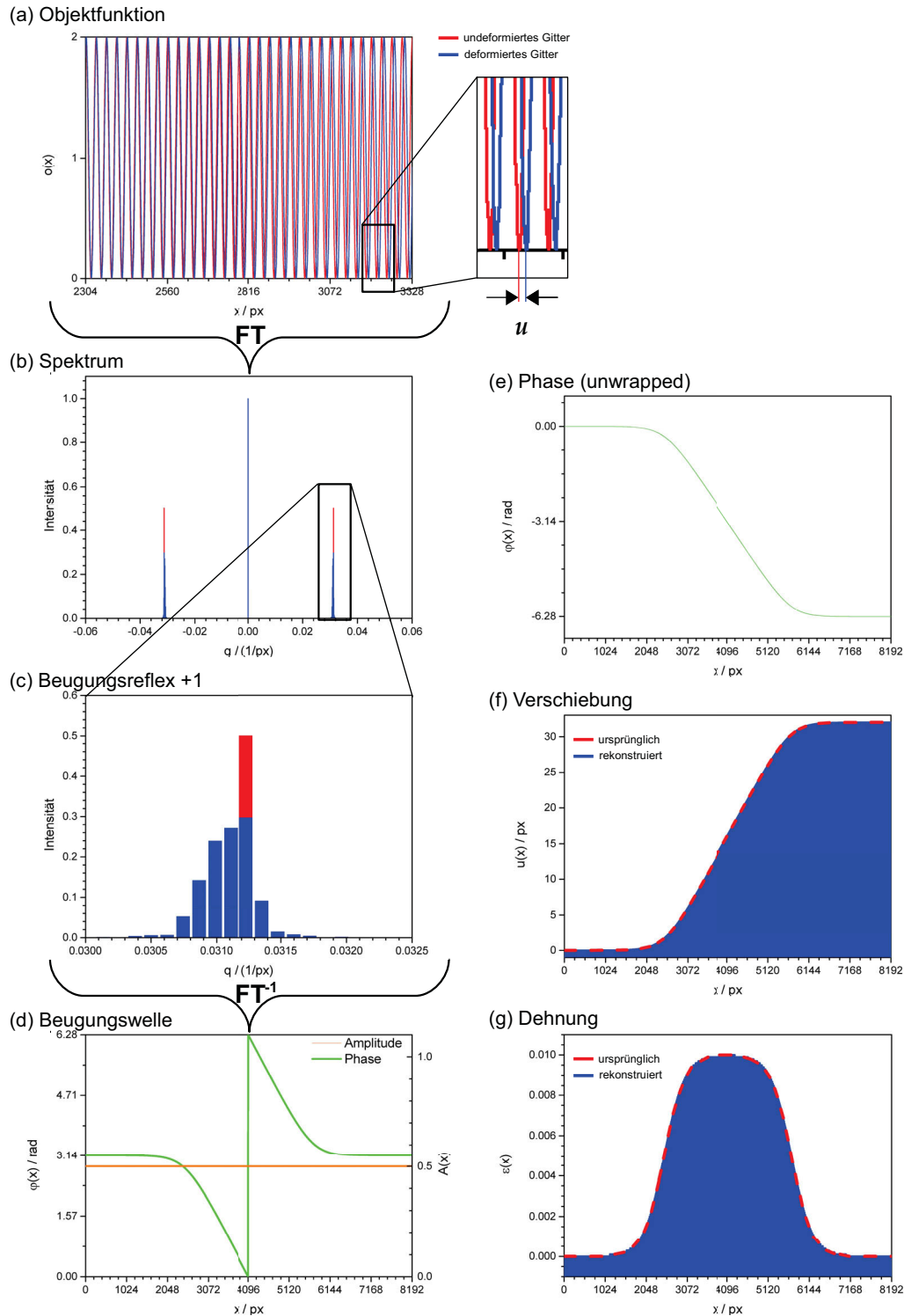


Abbildung 4.6: Deformiertes Kosinusgitter: a) Aufweitung des Kosinusgitters durch Verschiebung $u(x)$, undeformiertes Gitter (rot) vs. deformiertes Gitter (blau). b) Spektrum des undeformierten Gitters (rot) und des deformierten Gitters (blau). c) Der Beugungsreflex +1 des deformierten Beugungsgitters repräsentiert die komplexe Beugungswelle im Fourierraum. d) Amplitude und Phase der Beugungswelle. e) Phase der Beugungswelle mit kontinuierlichem Verlauf (*unwrapped*). f) Rekonstruierte Verschiebung (blau) vs. ursprüngliche Verschiebungsfunktion (rot). g) Rekonstruierte Dehnung (blau) vs. ursprüngliche Dehnungsfunktion (rot).

der Beugungsreflex bei $\delta(g - g_0)$ mit einer Blende aus dem Spektrum ausgeschnitten, was der in Abschnitt 4.1.2 beschriebenen Dunkelfeldabbildung entspricht. Das Ausschneiden der Beugungswelle aus dem Spektrum wird durch eine Multiplikation mit der Blendenfunktion $B(g - g_0)$ beschrieben:

$$\tilde{\psi}_{+g_0}(g) = \left[\frac{1}{2} \delta(g - g_0) \otimes \mathcal{FT} \left\{ e^{-i2\pi g_0 u(x)} \right\} \right] \cdot B(g - g_0). \quad (4.20)$$

Im Experiment verwendet man üblicherweise die gekippte Dunkelfeld-Beleuchtung, so dass sich der Beugungsreflex auf der optischen Achse befindet. Bei der Modellierung wird dies durch Zentrierung der Beugungswelle im Fourierraum berücksichtigt.

Die komplexe Beugungswelle in der Bildebene ergibt sich anschließend durch inverse Fouriertransformation:

$$\begin{aligned} \psi_{+g_0}(x) &= \mathcal{FT}^{-1} \left\{ \frac{1}{2} \delta(g) \otimes \mathcal{FT} \left\{ e^{-i2\pi g_0 u(x)} \right\} B(g) \right\} \\ &= \frac{1}{2} e^{-i2\pi g_0 u(x)} \otimes \mathcal{FT}^{-1} \{ B(g) \}. \end{aligned} \quad (4.21)$$

Somit ist die ursprüngliche Beugungswelle $\psi_{+g_0}(x) = \frac{1}{2} e^{-i2\pi g_0 u(x)}$ noch mit der inversen Fouriertransformierten der Blendenfunktion $\mathcal{FT}^{-1} \{ B(g) \}$ gefaltet. Allerdings ist der Radius der Blende g_B im TEM allgemeinen deutlich größer als die um den Reflex $\delta(g - g_0)$ verteilten Raumfrequenzanteile $g \ll g_B$, so dass die Einflüsse der Blende getrost vernachlässigt werden dürfen. Schließlich lautet die Beugungswelle in der Bildebene:

$$\psi_{+g_0}(x) \approx \frac{1}{2} e^{-i2\pi g_0 u(x)}. \quad (4.22)$$

Sie besitzt die konstante Amplitude $A = 1/2$ und die ortsabhängige, geometrische Phase $\varphi_{+g_0}(x) = -2\pi g_0 u(x)$, deren Verlauf in Abbildung 4.6d für die gewählte Modellfunktion von $u(x)$ dargestellt ist. Da die Phase nur im Intervall $[0, 2\pi]$ definiert ist, springt sie jedes Mal, wenn sie den Wert 2π erreicht, auf den Wert 0 zurück; man spricht von *phase wrapping*. Da diese Unstetigkeiten im Phasenverlauf in der weiteren Betrachtung stören, wird die Phase in Abbildung 4.6e mit einem kontinuierlichen Verlauf (*unwrapped*) dargestellt.

Die ortsabhängige Verschiebung $u_{rec}(x)$ kann nun sehr einfach aus der Phase $\varphi_{+g_0}(x)$ rekonstruiert werden:

$$u_{rec}(x) = -\frac{\varphi_{+g_0}(x)}{2\pi g_0}. \quad (4.23)$$

Sie ist im wesentlichen proportional zum negativen Phasenverlauf $-\varphi_{+g_0}(x)$ normiert um die reziproke Gitterkonstante. Daraus lässt sich die Deformation $\varepsilon_{rec}(x)$ durch die Ableitung der Verschiebung rekonstruieren:

$$\varepsilon_{rec}(x) = \frac{\partial u_{rec}(x)}{\partial x} = -\frac{1}{2\pi g_0} \frac{\partial \varphi_{+g_0}(x)}{\partial x}. \quad (4.24)$$

Die Deformation $\varepsilon_{rec}(x)$ ist also proportional zu dem negativen Gradienten der geometrischen Phase $\varphi_{+g_0}(x)$ normiert durch den Faktor $2\pi g_0$. Die Abbildungen 4.6f und 4.6g zeigen den Verlauf der rekonstruierten Verschiebung und der rekonstruierten Deformation am aufgeweiteten Modellgitter. Die blaue Kurve entspricht den rekonstruierten Verläufen $u_{rec}(x)$ und $\varepsilon_{rec}(x)$, die roten, gestrichelten Kurven zeigen zum Vergleich die Verläufe der Ausgangsfunktionen $u(x)$ und $\varepsilon(x)$. Es ist kein Unterschied festzustellen. Somit kann die

g_0/px	a	b/px^{-1}	x_1/px	x_2/px
1/4	-0,01; -0,5; -0,8	0,4	252	260

Tabelle 4.2: Parametersatz für die deformierten Kosinusgitter in Abbildung 4.7.

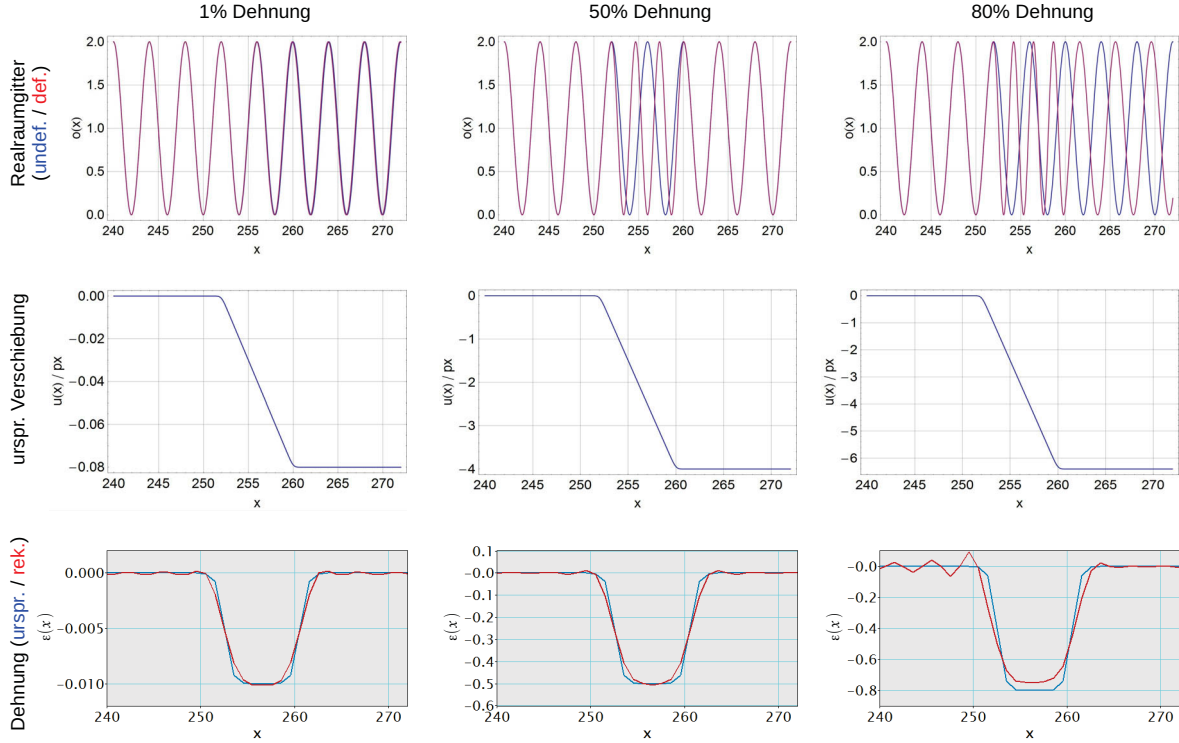


Abbildung 4.7: Grenzen der geometrischen Phase: Für kleine Dehnungen ($\varepsilon = 1 \dots 0,5$) ändert sich die Verschiebung u nur wenig über die Längenskala der Gitterkonstanten des Kosinusgitters $d = 4 \text{ px}$. Die Verzerrung wird korrekt aus der geometrischen Phase rekonstruiert. Dagegen kann die Verzerrung für sehr großen Dehnungen ($\varepsilon \lesssim 1$) nicht mehr korrekt rekonstruiert werden. So beträgt für $\varepsilon = 0,8$ die relative Abweichung zwischen ursprünglicher und rekonstruierter Dehnung bereits 10%.

Dehnung des Gitters aus der Phase einer Beugungswelle bestimmt werden. Als einziges Problem verbleibt, dass in der konventionellen TEM in der Bildebene nur die Intensität $I(x) = \psi_{+g_0}(x) \cdot \psi_{+g_0}^*(x)$, also das Amplitudenquadrat, der Beugungswelle aufgezeichnet werden kann und die Information über die geometrische Phase vollständig verloren geht. Daher benötigt man eine Methode, die es erlaubt die komplette Beugungswelle in Amplitude und Phase aufzuzeichnen. Die Dunkelfeld off-axis Elektronenholographie ist eine solche Methode. Sie soll in Kapitel 5 näher erläutert werden.

4.3.3 Grenzen der geometrische Phase

In Abschnitt 4.3.1 ergab sich die geometrische Phase $\varphi_G = 2\pi \mathbf{G} \cdot \mathbf{u}$ in der Beugungswelle des deformierten Kristalls als Folge des Verschiebungssatzes der Fouriertransformation, der besagt, dass jede Translation \mathbf{u} im Realraum zu der besagten geometrischen Phase im reziproken Raum führt. Als Näherung wurde dabei der konstante Verschiebungsvektor \mathbf{u} durch die ortsabhängige Verschiebung $\mathbf{u}(\mathbf{R})$ ersetzt. Notwendige Voraussetzung für die Gültigkeit dieser Näherung ist, dass sich die ortsabhängige Verschiebung $\mathbf{u}(\mathbf{R})$ nur wenig

über die Längenskala der Gitterkonstanten $d = 1/G_0$ des undeformierten Gitters ändert: $|\Delta u|/d \ll 1$. Die Bedeutung dieser Näherung für die geometrische Phase soll nun am Beispiel des deformierten Kosinusgitters in Abbildung 4.7 untersucht werden. Dazu wird das gleiche Modell für Deformation und Verschiebung verwendet wie in den Gleichungen (4.16) und (4.17) in Abschnitt 4.3.2. Allerdings werden die Parameter des Modells gemäß Tabelle 4.2 entsprechend angepasst. Insbesondere wird die Gitterkonstante des undeformierten Gitters auf $d = 1/G_0 = 4\text{ px}$ verringert. Das Gitter wird lediglich im Intervall $[0, 512]$ betrachtet. Die maximale Deformation a wird bei $x = 256$ erreicht. Mit $a < 0$ liegt eine Kompression vor, die auf einen sehr engen Bereich zwischen $x_1 = 252$ und $x_2 = 260$ begrenzt ist. Wie Abbildung 4.7 zeigt, führt diese Wahl der Parameter dazu, dass sich die Verschiebung $u(x)$ lediglich im Intervall $[250, 262]$ ändert, während sie außerhalb konstant bleibt. Die Länge des Intervalls $[250, 262]$ beträgt $\Delta x = 10\text{ px}$, was in etwa zwei Gitterkonstanten $2d = 8\text{ px}$ entspricht. Nun werden drei Fälle für die Wahl des Deformationsparameters a betrachtet: $a = -0,01$, $a = -0,5$ und $a = -0,8$ entsprechen 1 %, 50 % und 80 % kompressiver Dehnung. Für $a = -0,01$ beträgt im Intervall $\Delta x = 10\text{ px} \approx 2d$ die Verschiebung $\Delta u = -0,08\text{ px}$. Da hier die Bedingung $|\Delta u|/d \ll 1$ sicher erfüllt ist, lässt sich der Dehnungsverlauf aus der geometrischen Phase korrekt ableiten. Für $a = -0,5$ beträgt die Verschiebung bereits $\Delta u = -4\text{ px}$ und bewegt sich damit in der Größenordnung der Gitterkonstanten. Trotzdem wird auch in diesem Fall der Dehnungsverlauf aus der geometrischen Phase korrekt bestimmt. Sobald aber die Verzerrungen mit $a \lesssim 1$ sehr groß werden, lässt sich die Dehnung nicht mehr korrekt aus der geometrischen Phase rekonstruieren. So beträgt für $a = -0,8$ die Verschiebung $\Delta u = -7\text{ px}$, was in etwa der zweifachen Gitterkonstanten entspricht. In diesem Fall wird aus der rekonstruierten geometrischen Phase lediglich eine maximale Dehnung $\varepsilon = -0,7$ statt der modellierten $a = -0,8$ bestimmt. Die relative Abweichung zwischen der ursprünglich im Elementargitter modellierten und der tatsächlich rekonstruierten Dehnung beträgt ca. 10 %. Somit ist das Modell der geometrischen Phase ungeeignet, um sehr starke Verzerrungen zu beschreiben. Für eine Deformationsmessung an verspannten Halbleiterstrukturen ergeben sich hieraus jedoch keine Einschränkungen, da die zumessenden Deformationen üblicherweise im Bereich von 0,3 ... 2 % liegen.

4.3.4 Geometrische Phase bei dynamischer Streuung

Bisher wurde die geometrische Phase im Rahmen der kinematischen Theorie der Beugung betrachtet. Dazu wurde einerseits die Beugung der Elektronenwelle an einem Kristall durch geometrische Überlegungen abgeleitet, andererseits wurde die Ausbreitung der Beugungswelle hinter dem deformierten Gitter nach dem Hygen'schen Prinzip erklärt. Der Zusammenhang zwischen geometrischer Phase und Verschiebung der Gitterpunkte wurde an dem verzerrten eindimensionalen Kosinusgitter studiert. Obwohl die so gefundene Definition der geometrischen Phase bereits erlaubt, die später in dieser Arbeit durchgeführten Experimente zu erklären, existieren Einschränkungen. Erstens berücksichtigt die kinematische Theorie der Beugung nur die einfache Streuung an den Netzebenen des Kristalls. Deshalb reichte es aus, die geometrische Phase auch nur an dem deformierten, eindimensionalen Gitter zu diskutieren. Zweitens wurden Einflüsse, die aufgrund der endlichen Ausdehnung des Kristalls in Durchstrahlungsrichtung (z -Richtung) auftreten, ignoriert. Also stellt sich die Frage, wie die geometrische Phase aussieht, wenn man Mehrfachstreuung berücksichtigt und zusätzlich auch eine Verzerrung des Kristallgitters in z -Richtung zulässt. Eine Antwort liefert die dynamische Theorie der Beugung mittels der quantenmechanischen Betrachtung des Streuprozesses im elektrostatischen Potential des deformierten Kristallgitters.

4.3.4.1 Streuung im deformierten Kristall

Ausgangspunkt für die Beschreibung der Streuung zwischen Kristall und Elektronenwelle stellt die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung dar:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - e V(x, y, z) \right] \Psi(x, y, z) = E \Psi(x, y, z). \quad (4.25)$$

$\Psi(x, y, z)$ ist die Wellenfunktion der Elektronen, $V(x, y, z)$ bezeichnet das elektrische Potential des Kristalls, e die Elementarladung und $\hbar = h/(2\pi)$ das durch 2π geteilte Plancksche Wirkungsquantum h . Die relativistische Masse des Elektrons ist durch m gekennzeichnet und E repräsentiert die Gesamtenergie der Elektronen.

Die atomaren Potentiale der in dem periodischen Kristallgitter angeordneten Atome erzeugen zusammen das elektrische Potential $V(x, y, z)$ des Kristalls. Da $V(x, y, z)$ die selbe Periodizität wie das Kristallgitter besitzt, kann es als Fourierreihe entwickelt werden:

$$V(x, y, z) = \sum_{\mathbf{g}} \tilde{V}(\mathbf{g}, z) e^{-2\pi i \mathbf{g} \cdot \mathbf{r}}, \quad (4.26)$$

Allerdings erfolgt die Fourierentwicklung nur in Ebene parallel zur Austrittsfläche des Kristalls, so dass die Fourierkoeffizienten $\tilde{V}(\mathbf{g}, z)$ des Potentials abhängig von z bleiben. Dieser Ansatz ist vergleichbar zur *Multi-Slice-Methode*, bei der man sich den Kristall in einzelne Scheiben aus zweidimensionalen Gittern unterteilt vorstellt und die Wechselwirkung der Elektronenwelle mit dem Kristall aus Beugung an den Gitterebenen und anschließender Propagation zur nächsten Gitterebene beschreibt. Ab sofort bezeichnet der Vektor $\mathbf{r} = (x, y)^T$ die Ebenen parallel zur Austrittsfläche des Kristalls und der Vektor $\mathbf{g} = (g_x, g_y)^T$ die entsprechenden Ebenen im reziproken Raum. Dreidimensionale Vektoren werden wie bisher mit $\mathbf{R} = (x, y, z)^T$ bzw. $\mathbf{G} = (g_x, g_y, g_z)^T$ angegeben. Die z -Richtung verläuft parallel zur optischen Achse.

In einem deformierten Kristall wird die Periodizität des Kristallgitters durch das dreidimensionale Verschiebungsfeld $\mathbf{u}(x, y, z)$ gestört. Voraussetzung ist auch hier, dass das sich Verschiebungsfeld \mathbf{u} auf der Längenskala der Gitterkonstanten a nur wenig ändert, d.h. $|\Delta \mathbf{u}|/a \ll 1$ gilt, so dass die Verzerrung als kleine Störung aufgefasst werden kann. Daher kann wie in Abschnitt 4.3.1 auch jetzt wieder mit dem Verschiebungssatz der Fouriertransformation argumentiert werden, dass die Verschiebung \mathbf{u} zu einer zusätzlichen Phase $\exp[-2\pi i \mathbf{G} \cdot \mathbf{u}]$ in der Fourierentwicklung des Potential (4.26) führt. Da der Verschiebungssatz der Fouriertransformation jedoch nur für konstante Translationen \mathbf{u} gilt, behilft man sich mit einem Trick: Man unterteilt den Kristall in n Teilvolumina Ω_n , wobei jedes Teilvolumen größer als das Volumen einer Einheitszelle des Kristalls ist: $\Omega_n \gg \Omega_{ez}$. Da $|\Delta \mathbf{u}|/a \ll 1$ ist, darf man annehmen, dass die Verschiebung \mathbf{u}_n in jedem dieser Teilvolumen konstant ist. So kann man sich vorstellen, dass sich der verzerrte Kristall aus den n Teilvolumina zusammensetzt, wobei sich \mathbf{u}_n diskret von Teilvolumen zu Teilvolumen ändert. Das elektrische Potential in einem solchen n -ten Teilvolumen des Kristalls lautet (LUBK *et al.* 2014):

$$V_n(\mathbf{R}) \approx \sum_{\mathbf{G}} V_{ez}(\mathbf{G}) e^{-2\pi i \mathbf{G} \cdot (\mathbf{R} - \mathbf{u}_n - \mathbf{r}_n)}, \quad (4.27)$$

wobei die Fourierkoeffizienten des Potentials pro Einheitszelle $V_{ez}(\mathbf{G})$ durch eine sich in jedem n -ten Teilvolumen ändernde geometrische Phase $\exp[-2\pi i \mathbf{g} \cdot \mathbf{u}_n]$ moduliert werden. Dieser Trick ermöglicht, die Streuung im Kristall im Sinne der *column approximation* jeweils getrennt für die zylindrischen Teilvolumina mit dem Radius r_n zu betrachten. Dazu muss in jedem

zylindrischen Teilvolumen mit dem Radius r_n die Schrödinger-Gleichung mit dem Potential (4.27) gelöst werden (DE GRAEF 2003):

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - e \sum_{\mathbf{g}} \tilde{V}(\mathbf{g}, z) e^{-2\pi i \mathbf{g} \cdot (\mathbf{r}_n - \mathbf{u})} \right] \Psi(\mathbf{r}_n, z) = E \Psi(\mathbf{r}_n, z). \quad (4.28)$$

Hierbei erfüllen die Elektronen die Dispersionsrelation

$$K_0^2 = k_0^2 + k_{0z}^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E, \quad (4.29)$$

wobei der Wellenvektor \mathbf{K}_0 in die in-plane-Komponente $\mathbf{k}_0 = (k_{0x}, k_{0y})$ und die z-Komponente k_{0z} zerlegt wird. Des weiteren wird die Wechselwirkungskonstante

$$C_E = \frac{2\pi m e}{k_{0z} \hbar^2}. \quad (4.30)$$

eingeführt (DE GRAEF 2003). Mit diesen Bezeichnungen kann die Schrödinger-Gleichung in folgender Form geschrieben werden (der Index n wird im folgenden weggelassen):

$$\left[\Delta + 4\pi^2(k_0^2 + k_{0z}^2) + 4\pi k_{0z} C_E \sum_{\mathbf{g}} \tilde{V}(\mathbf{g}, z) e^{-2\pi i \mathbf{g} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{u})} \right] \Psi(\mathbf{r}, z) = 0. \quad (4.31)$$

Die Lösung dieser Gleichung erfolgt mit den bekannten Konzepten zur Streutheorie für hochenergetische Elektronen. Zunächst zerlegt man die Wellenfunktion in

$$\Psi(\mathbf{r}, z) = \psi(\mathbf{r}, z) e^{i2\pi k_{0z} z} \quad (4.32)$$

und setzt dies in die Schrödinger-Gleichung ein:

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + 4\pi^2 k_0^2 + \frac{\partial^2}{\partial z^2} + i4\pi k_{0z} \frac{\partial}{\partial z} \right] \psi(\mathbf{r}, z) = -4\pi k_{0z} C_E \sum_{\mathbf{g}} \tilde{V}(\mathbf{g}, z) e^{-2\pi i \mathbf{g} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{u})} \psi(\mathbf{r}, z). \quad (4.33)$$

Da angenommen wird, dass die Elektronen im Kristall lediglich vorwärts und in kleine Winkel gestreut werden, darf man nun die zweite Ableitung nach z vernachlässigen, da sie stets klein im Vergleich zu dem Term mit der ersten Ableitung nach z ist (AMELINCKX *et al.* 2008; DE GRAEF 2003). Diese Näherung wird Paraxial- bzw. Hochenergienäherung genannt:

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + 4\pi^2 k_0^2 + i4\pi k_{0z} \frac{\partial}{\partial z} \right] \psi(\mathbf{r}, z) = -4\pi k_{0z} C_E \sum_{\mathbf{g}} \tilde{V}(\mathbf{g}, z) e^{-2\pi i \mathbf{g} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{u})} \psi(\mathbf{r}, z). \quad (4.34)$$

Da das Potential periodisch ist, ergeben sich als Ansatz für die Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r}, z)$ Blochwellen. So kann in paraxialer Näherung die Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r}, z)$ in der Form

$$\psi(\mathbf{r}, z) = e^{i2\pi k_0 \cdot \mathbf{r}} \sum_{\mathbf{g}} \tilde{\psi}(\mathbf{g}, z) e^{i2\pi \mathbf{g} \cdot \mathbf{r}} \quad (4.35)$$

geschrieben werden. Setzt man den Ansatz (4.35) in die Schrödinger-Gleichung (4.34) ein,

ergibt sich die Differentialgleichung:

$$\sum_{\mathbf{g}} \left[4\pi^2 [k_0^2 - (\mathbf{k}_0 + \mathbf{g})^2] \tilde{\psi}(\mathbf{g}, z) + i4\pi k_{0z} \frac{\partial \tilde{\psi}(\mathbf{g}, z)}{\partial z} \right] e^{i2\pi(\mathbf{k}_0 + \mathbf{g}) \cdot \mathbf{r}} \\ = -4\pi k_{0z} C_E \sum_{\mathbf{g}'} \sum_{\mathbf{g}''} V(\mathbf{g}'', z) e^{i2\pi \mathbf{g}'' \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{u})} \tilde{\psi}(\mathbf{g}, z) e^{i2\pi(\mathbf{k}_0 + \mathbf{g}') \cdot \mathbf{r}}. \quad (4.36)$$

Man multipliziert die Gleichung mit $e^{-i2\pi(\mathbf{k}_0 + \mathbf{g}) \cdot \mathbf{r}}$ und integriert über alle \mathbf{r} . Auf der linken Seite heben sich wegen Orthogonalität alle Terme in der Summe über \mathbf{g} weg bis auf den Term, der den gleichen Faktor $\mathbf{k}_0 + \mathbf{g}$ in seinem Exponenten besitzt. Auf der rechten Seite bleiben unter der Doppelsumme Terme übrig, die den Faktor $\mathbf{k}_0 + \mathbf{g}' + \mathbf{g}''$ im Exponenten besitzen. Da man jedoch den reziproken Gittervektor \mathbf{g}'' auch durch einen beliebigen anderen reziproken Gittervektor ausdrücken kann, z.B. durch $\mathbf{g}'' = \mathbf{g} - \mathbf{g}'$, gilt $\mathbf{k}_0 + \mathbf{g} = \mathbf{k}_0 + \mathbf{g}' + \mathbf{g}''$. So ergibt sich:

$$4\pi^2 [k_0^2 - (\mathbf{k}_0 + \mathbf{g})^2] \tilde{\psi}(\mathbf{g}, z) + i4\pi k_{0z} \frac{\partial \tilde{\psi}(\mathbf{g}, z)}{\partial z} \\ = -4\pi k_{0z} C_E \sum_{\mathbf{g}'} V(\mathbf{g}' - \mathbf{g}, z) e^{-i2\pi(\mathbf{g}' - \mathbf{g}) \cdot \mathbf{u}} \tilde{\psi}(\mathbf{g}', z). \quad (4.37)$$

Nach Division durch $i4\pi k_{0z}$ erhält man

$$\left[\frac{\partial}{\partial z} - i2\pi \frac{k_0^2 - (\mathbf{k}_0 + \mathbf{g})^2}{2k_{0z}} \right] \tilde{\psi}(\mathbf{g}, z) = iC_E \sum_{\mathbf{g}'} V(\mathbf{g}' - \mathbf{g}, z) e^{-i2\pi(\mathbf{g}' - \mathbf{g}) \cdot \mathbf{u}} \tilde{\psi}(\mathbf{g}', z), \quad (4.38)$$

wobei nun auf der linken Seite der Anregungsfehler

$$s_g = \frac{k_0^2 - (\mathbf{k}_0 + \mathbf{g})^2}{2k_{0z}} = -\frac{\mathbf{g}^2 + 2\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{g}}{2k_{0z}} \quad (4.39)$$

auftritt (vgl. Abschnitt 4.2.2). Schließlich lässt sich die Gleichung vereinfachen zu:

$$\left[\frac{d}{dz} - i2\pi s_g \right] \tilde{\psi}(\mathbf{g}, z) = iC_E \sum_{\mathbf{g}'} V(\mathbf{g}' - \mathbf{g}, z) e^{-i2\pi(\mathbf{g}' - \mathbf{g}) \cdot \mathbf{u}} \tilde{\psi}(\mathbf{g}', z). \quad (4.40)$$

Diese Gleichung repräsentiert einen Satz von n gekoppelten Differentialgleichungen für die Amplitude $\tilde{\psi}(\mathbf{g}, z)$ der Beugungswelle $\psi(\mathbf{r}, z)$ am deformierten Kristall. Sie werden *Howie-Whelan-Gleichungen* genannt, da sie 1961 von Howie und Whelan sowohl für den undeformierten als auch den deformierten Kristall im Rahmen der dynamischen Streutheorie für Elektronen abgeleitet wurden (HOWIE und WHELAN 1961). Die Gleichungen für den undeformierten Kristall ergeben sich mit $\mathbf{u} = 0$.

Die Howie-Whelan-Gleichungen repräsentieren die theoretische Beschreibung für die experimentelle Beobachtung, dass die Änderung in der Amplitude der Beugungswelle $\tilde{\psi}(\mathbf{g}, z)$ pro Objektdicke dz (erster Term linke Seite) mit dem aktuellen Wert der Amplitude (zweiter Term linke Seite) und den Amplituden aller anderen Beugungswellen (Summe über \mathbf{g}' rechte Seite) gekoppelt ist. Die Stärke der Kopplung wird durch die Fourierkomponente $V(\mathbf{g}' - \mathbf{g}, z)$ des Potentials bestimmt. Leider ist eine analytische Lösung Howie-Whelan-Gleichungen für mehr als zwei Wellen unmöglich, so dass man in diesen Fällen auf numerische Methoden mit Multi-Slice- oder Blochwellenrechnungen zurückgreifen muss. Einzig im Zweistrahlfall, bei dem sich die Gesamtintensität der Welle auf die ungebeugte und die gebeugte Welle aufteilt, lässt sich eine analytische Lösung angeben. Er besitzt durchaus experimentelle Relevanz,

da man bei der Dunkelfeldabbildung bewusst die Zweistrahlbedingung einstellt, um die Intensität in der abgebeugten Welle zu maximieren.

4.3.4.2 Zweistrahlfall im deformierten Kristall

Im Zweistrahlfall reduzieren sich die Howie-Whelan-Gleichungen (4.40) auf zwei gekoppelte Differentialgleichungen 1. Ordnung:

$$\begin{aligned}\frac{d\tilde{\psi}_0}{dz} &= iC_E V_0 \tilde{\psi}_0 + iC_E \tilde{V}_{-g} e^{+2\pi i g \cdot \mathbf{u}} \tilde{\psi}_g \\ \frac{d\tilde{\psi}_g}{dz} &= i2\pi s_g \tilde{\psi}_g + iC_E V_0 \tilde{\psi}_g + iC_E \tilde{V}_g e^{-2\pi i g \cdot \mathbf{u}} \tilde{\psi}_0,\end{aligned}\quad (4.41)$$

mit der Amplitude $\tilde{\psi}_0$ der ungebeugten und $\tilde{\psi}_g$ der gebeugten Welle. Hierbei wurde das Potential $\tilde{V}(\mathbf{g}, z) \rightarrow \frac{1}{a} \int \tilde{V}(\mathbf{g}, z) dz$ in z -Richtung über die Objektdicke integriert und $V_0 \rightarrow \frac{1}{a} \int \tilde{V}(0, z) dz$ repräsentiert das projizierte mittlere innere Potential des Kristalls, das üblicher Weise in der Größenordnung von 5...50 V liegt (DE GRAEF 2003).

Wie sich durch Einsetzen leicht zeigen lässt, kann der Anteil des projizierten mittleren inneren Potentials mit Hilfe der Transformationen $\tilde{\psi}_0 \rightarrow \tilde{\psi}_0 e^{iC_E V_0 z}$ und $\tilde{\psi}_g \rightarrow \tilde{\psi}_g e^{iC_E V_0 z}$ in die Amplitude integriert werden, so dass die Howie-Whelan-Gleichungen die bekannte übersichtliche Form annehmen (DE GRAEF 2003):

$$\begin{aligned}\frac{d\tilde{\psi}_0}{dz} &= iC_E \tilde{V}_{-g} e^{+2\pi i g \cdot \mathbf{u}} \tilde{\psi}_g \\ \frac{d\tilde{\psi}_g}{dz} &= i2\pi s_g \tilde{\psi}_g + iC_E \tilde{V}_g e^{-2\pi i g \cdot \mathbf{u}} \tilde{\psi}_0,\end{aligned}\quad (4.42)$$

Für $\mathbf{u} = 0$ gehen diese Gleichungen über in die Howie-Whelan-Gleichungen für den Zweistrahlfall am undeformierten Kristall. Die zwei Differentialgleichungen 1. Ordnung lassen sich leicht lösen, indem man sie in eine Differentialgleichung 2. Ordnung für die Amplitude $\tilde{\psi}_g$ der abgebeugten Welle

$$\frac{d^2 \tilde{\psi}_g}{dz^2} = \left[-i2\pi \left(\frac{\partial(\mathbf{g} \cdot \mathbf{u}(z))}{\partial z} - s_g \right) \frac{d}{dz} - C_E^2 \tilde{V}_g \tilde{V}_{-g} - 4\pi^2 \frac{\partial(\mathbf{g} \cdot \mathbf{u}(z))}{\partial z} s_g \right] \tilde{\psi}_g, \quad (4.43)$$

und die Amplitude $\tilde{\psi}_0$ der ungebeugten Welle

$$\frac{d^2 \tilde{\psi}_0}{dz^2} = \left[i2\pi \left(\frac{\partial(\mathbf{g} \cdot \mathbf{u}(z))}{\partial z} + s_g \right) \frac{d}{dz} - C_E^2 \tilde{V}_g \tilde{V}_{-g} \right] \tilde{\psi}_0 \quad (4.44)$$

überführt. Die Gleichungen ähneln den in der Physik wohlbekannten Gleichungen des gedämpften harmonischen Oszillators, mit dem Unterschied, dass nun Ableitungen $\frac{\partial \mathbf{u}(z)}{\partial z}$ auftreten. Eine geschlossene analytische Lösung für ein z -abhängiges Verschiebungsfeld $\mathbf{u}(z)$ existiert nicht. Jedoch besteht die Möglichkeit, durch besondere Wahl von $\mathbf{u}(z)$ oder durch Näherungen eine Lösung zu finden (LUBK *et al.* 2014).

4.3.4.3 Analytische Lösung für z -unabhängige Verschiebung

Wenn das Verschiebungsfeld \mathbf{u} nicht von z abhängt, erhält man die aus Lehrbüchern bekannten Lösungen für den dynamischen Zweistrahlfall an einem unverspannten Kristall:

$$\tilde{\psi}_{1,2} = \exp(2\pi i k_{1,2} z), \quad \text{mit } k_{1,2} = \frac{s_g}{2} \pm \kappa_g \quad \text{und} \quad \kappa_g = \pm \frac{1}{2\pi} \sqrt{\pi^2 s_g^2 + C_E^2 \tilde{V}_g \tilde{V}_{-g}}. \quad (4.45)$$

Mit den Randbedingungen an der Ein- und der Austrittsfläche des Kristalls

$$\tilde{\psi}_g(0) = 0 \quad \text{und} \quad \frac{1}{iC_E \tilde{V}_g} \frac{d\tilde{\psi}_g}{dz}(0) = \tilde{\psi}_0(0) = 1 \quad (4.46)$$

ergibt sich die Amplitude der gebeugten Welle

$$\tilde{\psi}_g = \frac{C_E \tilde{V}_g}{2\pi(k_1 - k_2)} \left(e^{2\pi i k_1 z} - e^{2\pi i k_2 z} \right). \quad (4.47)$$

Entsprechend folgt aus den Randbedingungen

$$\tilde{\psi}_0(0) = 1 \quad \text{und} \quad \frac{1}{iC_E \tilde{V}_g} \frac{d\tilde{\psi}_0}{dz}(0) = \tilde{\psi}_g(0) = 1 \quad (4.48)$$

die Amplitude der ungebeugten Welle

$$\tilde{\psi}_0 = \frac{1}{k_1 - k_2} \left(k_1 e^{2\pi i k_2 z} - k_2 e^{2\pi i k_1 z} \right). \quad (4.49)$$

Zusätzlich definiert man die Extinktionsdicke

$$\xi_g = \pi / \sqrt{\pi^2 s_g^2 + C_E^2 \tilde{V}_g \tilde{V}_{-g}}, \quad (4.50)$$

als diejenige Objektdicke, bei der die Amplitude $\tilde{\psi}_g$ der gebeugten Welle verschwindet und gleichzeitig die Amplitude $\tilde{\psi}_0$ der ungebeugten Welle ein Maximum annimmt. Die Lösungen (4.47) und (4.49) heißen *Pendellösung*, weil sie die experimentelle Beobachtung beschreiben, dass die Gesamtintensität abhängig von der Objektdicke z und dem Anregungsfehler s_g zwischen der gebeugten und der ungebeugten Welle oszilliert. Diese Tatsache dient in Abschnitt 5.11 dazu, ein Kriterium für die optimale Objektdicke in der Dunkelfeldholographie abzuleiten. Um die weitere physikalische Interpretation übersichtlich zu halten, wird der Anregungsfehler vernachlässigt, ohne dass dadurch die allgemeine physikalische Interpretation an Gültigkeit verlore. Für $s_g = 0$ lauten die Amplituden der gebeugten Welle $\tilde{\psi}_g = \sin(2\pi \kappa_g z)$ und der ungebeugten Welle $\tilde{\psi}_0 = \cos(2\pi \kappa_g z)$.

4.3.4.4 Näherungslösung für z -abhängige Verschiebung

Im allgemeinen ist die Verschiebung \mathbf{u} in den Gleichungen (4.43) und (4.44) z -abhängig, was nicht vernachlässigt werden darf. Da die Variationen von $\mathbf{u}(z)$ in z -Richtung nach Voraussetzung sehr klein sind, kann man, wie LUBK *et al.* (2014) gezeigt haben, die Gleichungen nach den $\frac{\partial(\mathbf{g} \cdot \mathbf{u}(z))}{\partial z} \ll 1$ ähnlich einer quantenmechanischen Störungsrechnung entwickeln, um eine Lösung für die geometrische Phase zu erhalten. Dazu werden die Gleichungen mit der Methode der Green'schen Funktion in Integralgleichungen überführt, die anschließend in eine Neumann-Reihe um $\frac{\partial(\mathbf{g} \cdot \mathbf{u}(z))}{\partial z} \ll 1$ entwickelt werden, wobei die Entwicklung bereits nach dem linearen Term abgebrochen wird. Anstatt diese mathematisch-technische Methode im Detail zu rezitieren, soll statt dessen eine dort nur kurz skizzierte Herleitung der geometrischen Phase aus der Pendellösung ausführlicher dargestellt werden.

Man betrachtet wiederum jedes Teilvolumen Ω_n separat im Sinne der *column approximation*. Nach Voraussetzung war in Ω_n die Verschiebung $\mathbf{u}(z)$ in Richtung \mathbf{r}_n konstant, variiert aber mit z zwischen der Ein- und Austrittsfläche des Kristalls. Daher werden sowohl gebeugte als auch ungebeugte Welle wie im Fall der kinematischen Streuung in Abschnitt 4.3.1 eine

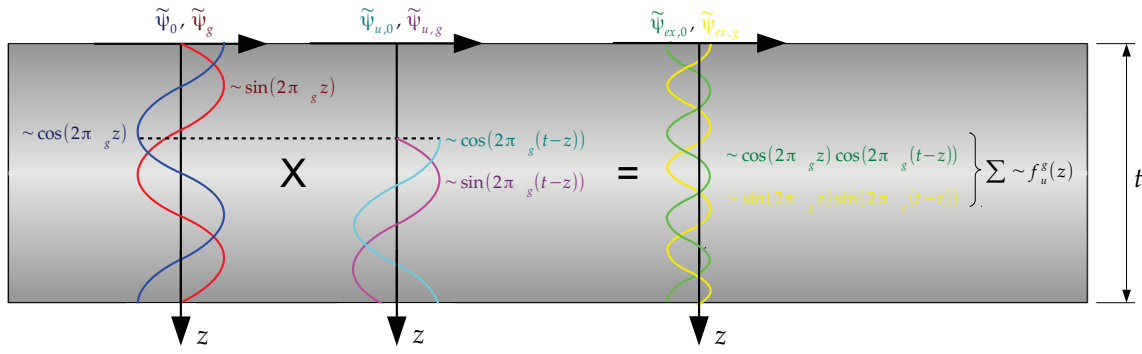


Abbildung 4.8: Zur Diskussion der geometrischen Phase bei z -abhängiger Verschiebung $u(z)$: Amplitude $\tilde{\psi}_g$ und $\tilde{\psi}_0$ von gebeugter und ungebeugter Welle werden in der Tiefe z wegen $u(z)$ um die geometrische Phase $\varphi_g \sim -2\pi g \cdot u(z)$ verschoben; es entstehen die neuen Amplituden $\tilde{\psi}_{u,g}$ und $\tilde{\psi}_{u,0}$. Wegen dieser kleinen Störung können die Amplituden an der Austrittsfläche $\tilde{\psi}_{ex,g} = \tilde{\psi}_g \cdot \tilde{\psi}_{u,g}$ und $\tilde{\psi}_{ex,0} = \tilde{\psi}_0 \cdot \tilde{\psi}_{u,0}$ geschrieben werden. Die Summe ist proportional zur Gewichtung $f_u^g(z)$, die den Beitrag von $u(z)$ zu φ_g bestimmt.

geometrische Phase $\varphi_g \sim -2\pi g \cdot u(z)$ erfahren. Jedoch wird aufgrund der z -Abhängigkeit der Verschiebung $u(z)$ diese geometrische Phase in jeder Tiefe z des Kristalls verschieden sein. Daher darf man sich die Amplitude sowohl von gebeugter als auch ungebeugter Welle an der Austrittsfläche des Kristalls als Summe von gebeugten Wellen vorstellen, die in der Tiefe z eine entsprechende geometrische Phase $\varphi_g \sim -2\pi g \cdot u(z)$ erfahren haben. Die dynamische Theorie (Gleichung 4.40) sagt aus, dass die Amplitude der gebeugten Welle lokal, d.h. in jeder Tiefe z , sowohl von der Amplitude der gebeugten Welle selbst als auch von der Amplitude der ungebeugten Welle abhängt. Also wird auch die geometrische Phase mit der Tiefe z zu gewichten sein, wobei die Gewichtung gerade aus den Amplituden von gebeugter und ungebeugter Welle bestimmt wird. Wie Abbildung 4.8 illustriert, wird für die Amplitude $\tilde{\psi}_g = \sin(2\pi\kappa_g z)$ der gebeugten Welle wegen $u(z)$ in der Tiefe z eine neue gebeugte Welle mit der Amplitude $\tilde{\psi}_{u,g} = \sin(2\pi\kappa_g(t-z))$ erzeugt und für die ungebeugte Welle mit der Amplitude $\tilde{\psi}_0 = \cos(2\pi\kappa_g z)$ die neue ungebeugte Welle mit der Amplitude $\tilde{\psi}_{u,0} = \cos(2\pi\kappa_g(t-z))$. Die Gewichtung für $u(z)$ erhält man aus der Multiplikation der Amplitude der (un)gebeugten Welle in der Tiefe z mit der Amplitude der (un)gebeugten Welle in der Austrittsebene t des Kristalls und anschließender Addition der beiden Anteile. Für den Anteil der gebeugten Welle beträgt die Gewichtung:

$$f_{u,g}^g \sim \sin(2\pi\kappa_g z) \cdot \sin(2\pi\kappa_g(t-z)), \quad (4.51)$$

und für den Anteil der ungebeugten Welle:

$$f_{u,0}^g \sim \cos(2\pi\kappa_g z) \cdot \cos(2\pi\kappa_g(t-z)). \quad (4.52)$$

Mit Hilfe eines Additionstheorems ergibt sich die Gesamtgewichtungsfunktion $f_u^g(z) = f_{u,g}^g + f_{u,0}^g = \cos(-2\pi\kappa_g(t-2z))$. Somit besitzt die geometrische Phase der gebeugten Welle an der Austrittsfläche des Kristalls die Form (LUBK *et al.* 2014):

$$\varphi_g = -2\pi g \cdot \int_0^t f_u^g(z) u(z) dz. \quad (4.53)$$

Darin bringt der Integralkern $f_u^g(z)$ die z -abhängige Gewichtung der Verschiebung $u(z)$ im Kristall zum Ausdruck. Die Integration über die Objektdicke t berücksichtigt, dass die Gewichtung proportional zur Amplitude der Gesamtwellenfunktion an der Austrittsfläche des Kristalls erfolgt, wobei diese Amplitude als Summe der Amplituden der gebeugten Wellen interpretiert werden kann, die in jeder Tiefe z durch $u(z)$ erzeugt werden. Da für $u(z) = u = \text{const.}$ die geometrische Phase $\varphi_g = -2\pi g \cdot u$ beträgt, muss $\int f_u^g(z) dz = 1$ gelten, womit man eine Normierung für $f_u^g(z)$ und damit deren endgültige Form erhält (LUBK *et al.* 2014):

$$f_u^g(z) = \frac{2\pi\kappa_g \cos(2\pi\kappa_g(t - 2z))}{\sin(2\pi\kappa_g t)}. \quad (4.54)$$

Für den Fall einer z -unabhängigen Verschiebung u (zweidimensionales Verzerrungsfeld) ergibt sich die bereits mit Hilfe der kinematischen Theorie in Abschnitt 4.3.1 abgeleitete Form der geometrischen Phase $\varphi_g(x, y) = -2\pi g \cdot u(x, y)$. Weil sie linear mit dem zweidimensionalen, z -unabhängigen Verschiebungsfeld $u(x, y)$ im Kristall verknüpft ist, kann, wie am Elementargitter in Abschnitt 4.3.2 gezeigt, durch Messung der Phasenverteilung $\varphi_g(x, y)$ in der Austrittsfläche des Kristalls auf $u(x, y)$ geschlossen werden.

Für den Fall einer z -abhängigen Verschiebung $u(z)$ (dreidimensionales Verzerrungsfeld) wird die z -Komponente der Verschiebung durch Integration über die Objektdicke t und Gewichtung durch den Integralkern $f_u^g(z)$ in die zweidimensionale Phasenverteilung $\varphi_g(x, y)$ in der Austrittsfläche des Kristalls übertragen. Dabei oszilliert $f_u^g(z)$ mit der Eindringtiefe z und hängt gleichzeitig noch von der Objektdicke t , sowie wegen $\kappa_g = 1/(2\xi_g)$ von der Extinktionsdicke ξ_g ab; d.h. $f_u^g(z)$ ist für jedes g verschieden. Somit kann aus einer Messung der Phasenverteilung $\varphi_g(x, y)$ nicht mehr ohne weiteres der zweidimensionale Anteil $u(x, y)$ des dreidimensionalen Verschiebungsfeldes $u(x, y, z)$ rekonstruiert werden. Vielmehr ist in der Phase $\varphi_g(x, y)$ jetzt auch Information über den z -abhängigen Anteil des Verschiebungsfeldes $u(x, y, z)$ kodiert. Dabei ist es weder möglich aus der zweidimensionalen Phase $\varphi_g(x, y)$, die dreidimensionale Verschiebung $u(x, y, z)$ zu bestimmen, noch den Anteil $u(z)$ aus der geometrischen Phase $\varphi_g(x, y)$ zu eliminieren. Hieraus ergeben sich im allgemeinen erhebliche Konsequenzen für die experimentelle Bestimmung von zweidimensionaler Verschiebung $u(x, y)$ und Verzerrung $\varepsilon(x, y)$ aus einer Messung der geometrischen Phase. Es stellen sich zwei Fragen: Unter welchen Bedingungen repräsentiert die aus $\varphi_g(x, y)$ rekonstruierte Verschiebung $u(x, y)$ die originale zweidimensionale Verschiebung? Wie groß sind die Abweichungen zwischen der rekonstruierten und der originalen Verschiebung, die durch den z -abhängigen Anteil des Verschiebungsfeldes $u(z)$ hervorgerufen werden?

4.3.4.5 Konsequenzen für die Deformationsmessung

Bei verspannten Transistoren im speziellen kann man in erster Näherung davon ausgehen, dass die zu messenden Verschiebungen und Verzerrungen in z -Richtung konstant sind. Wie Abschnitt 3 erläutert wird die mechanische Verspannung aus technologischen Gründen einzig in der Richtung parallel zum Transistorkanal, also in der (x, y) -Ebene, benötigt. Daher sind die Techniken zur Verspannungserzeugung so gestaltet, dass sie nur in der (x, y) -Ebene Verspannungen erzeugen. In z -Richtung werden (in erster Näherung) schon deshalb keine Verspannungen erzeugt, weil Transistoren eine rein planare Strukturierung in der (x, y) -Ebene besitzen, d.h. in einer TEM-Probe darf man sich die Transistorstruktur in z -Richtung konstant denken. Bei genauerer Betrachtung jedoch tritt an den Oberflächen einer TEM-Probe Oberflächenrelaxation auf, die wie ein z -abhängiges Verschiebungsfeld in Oberflächennähe wirkt und mit dem in z -Richtung konstanten Verschiebungsfeld $u(x, y)$ überlagert. Dadurch wird in der Austrittsebene nicht mehr das in z konstante Verschiebungsfeld $u(x, y)$ detektiert,

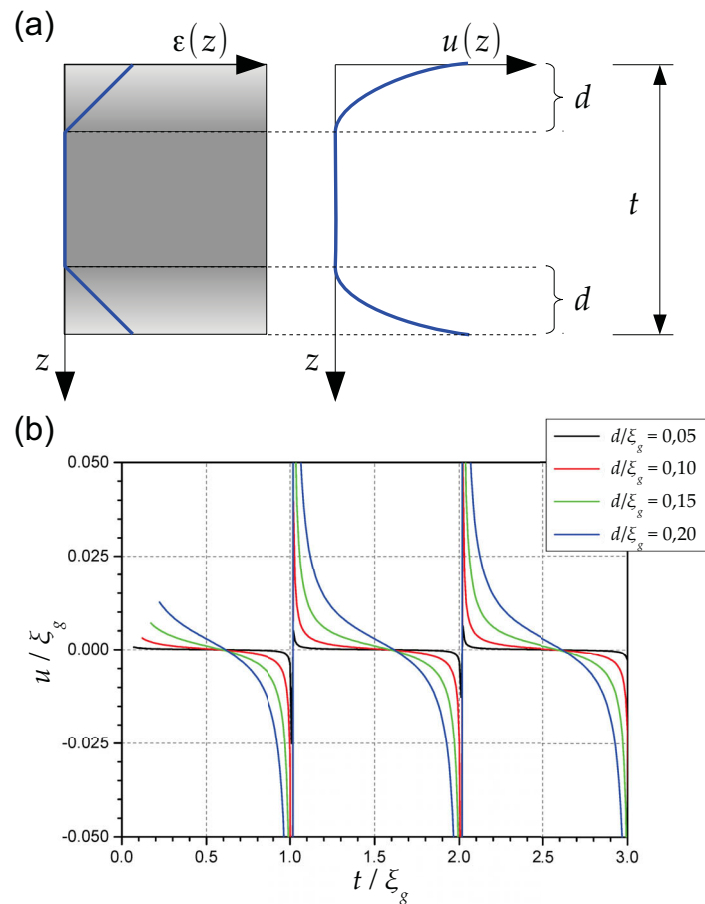


Abbildung 4.9: a) Modell für Oberflächenrelaxation $u(z)$ und zugehöriger Verschiebung $u(z)$ in relaxierten Oberflächenschichten der Dicke d . b) Mittel Gleichung (4.53) berechnete Verschiebung u in Abhängigkeit der Objektdicke t normiert auf die Extinktionsdicke ξ_g für verschiedene Dicken d der relaxierten Schichten.

sondern die gewichtete Projektion von $u(x, y)$. Als Folge wird das Messergebnis von $u(x, y)$ von dem konstanten Verschiebungsfeld im Inneren des Kristalls abweichen, wobei es schwierig ist, die Größe der Abweichung exakt anzugeben, weil die genaue Form der Oberflächenrelaxation, also der Verlauf von $u(z)$ nahe der Oberfläche unbekannt ist.

Die durch Oberflächenrelaxation hervorgerufenen Effekte lassen sich anhand des in Abbildung 4.9 gezeigten Beispiels diskutieren. In der Regel weisen TEM-Proben eine symmetrische Relaxation an den Oberflächen bei $z = 0$ und $z = t$ auf, wobei sich z und t nur auf die kristalline Dicke der TEM-Probe beziehen, da z.B. durch die Präparation hervorgerufene, rein amorphe Oberflächenschichten nicht zur geometrischen Phase beitragen. Abbildung 4.9a illustriert, wie sich das Kristallgitter an den Oberflächen eines ansonsten undeformierten Kristalls aufgrund fehlender Bindungen aufweitet. Solche Oberflächenrelaxationen treten typischerweise an Grenzflächen auf. Da es unmöglich ist, den genauen Verlauf $\varepsilon(z)$ anzugeben, soll in erster Näherung angenommen werden, die Aufweitung $\varepsilon(z)$ des Gitters beginne in der Tiefe $z_1 = d$ und $z_2 = t - d$ und setze sich linear bis zu den Oberflächen bei $z = 0$ und $z = t$ fort, wo die maximale Gitteraufweitung $\varepsilon_{z, \max} = 1\%$ erreicht werde. Somit kann die Relaxation durch folgendes Deformationsfeld beschreiben

werden:

$$\varepsilon(z) = \begin{cases} -0,01 (z - d), & \text{wenn } z \leq d, \\ 0, & \text{wenn } d < z < t - d, \\ +0,01 (z - (t - d)), & \text{wenn } t - d \leq z < t. \end{cases} \quad (4.55)$$

Wegen $\varepsilon(z) = \partial u(z)/\partial z$ ist der Verlauf der zugehörigen Verschiebung $u(z)$ quadratisch in z :

$$u(z) = \begin{cases} 0,005 (z - d)^2, & \text{wenn } z \leq d, \\ 0, & \text{wenn } d < z < t - d, \\ 0,005 (z - (t - d))^2, & \text{wenn } t - d \leq z < t. \end{cases} \quad (4.56)$$

Die geometrische Phase $\varphi_g(x, y)$ sowie die Verschiebung $u(x, y)$ an der Austrittsfläche des Kristalls bei $z = t$ können anhand von Gleichung (4.53) berechnet werden; sie hängen nun von der Kristalldicke t , sowie dem Verlauf $u(z)$ der Relaxationsbereiche und deren Dicke d ab. Um diese Einflüsse unabhängig von g diskutieren zu können, werden folgende reduzierte, auf die Extinktionsdicke ξ_g normierte Koordinaten $z \rightarrow z/\xi_g$ und $t \rightarrow t/\xi_g$ eingeführt. An Abbildung 4.9b kann der Wert der Verschiebung, ebenfalls angegeben in Vielfachen u/ξ_g der Extinktionsdicke, in Abhängigkeit von der Kristalldicke t/ξ_g für ausgewählte Dicken d der relaxierten Schichten abgelesen werden. Obwohl nach Voraussetzung im idealen Kristall keine Verschiebung zu erwarten ist, werden an der Austrittsfläche des Kristalls in Folge der Oberflächenrelaxation Verschiebungen $u/\xi_g \neq 0$ detektiert. Die Abweichungen $u/\xi_g \neq 0$ werden umso größer, je näher die Kristalldicke t/ξ_g an ganzzahligen Vielfachen der Extinktionsdicke ξ_g liegt. Für $t < \xi_g$ treten negative Verschiebungen $u/\xi_g < 0$ auf, dort liefert die Wichtungsfunktion (4.54) negative Beiträge. Für $t > \xi_g$ treten positive Verschiebungen $u/\xi_g > 0$ auf, dort liefert die Wichtungsfunktion nur positive Beiträge. Die Abweichungen werden umso größer, je größer die Dicke d der relaxierten Schichten ist. Nur für ganz bestimmte Kristalldicken besitzt die Verschiebung den Wert $u = 0$. An ganzzahligen Vielfachen der Extinktionsdicke divergiert $f_u^g(z)$, so dass u/ξ_g dort extrem große Werte annimmt. Außerhalb dieser Bereiche führt die Oberflächenrelaxation je nach Dicke d der Relaxationsschichten zu einer künstlichen Verschiebung $u(x, y)$, die bis zu 1 % der Extinktionsdicke betragen kann. In diesen Effekten äußert sich also die komplexe Abhängigkeit der Wichtung $f_u^g(z)$ und des z -abhängigen Beitrages der Deformation $u(z)$ mit dem in der Austrittsebene des Kristalls aufgezeichneten Verschiebungsfeld $u(x, y)$.

Anstatt des ansonsten undeformierten Kristalls soll jetzt ein Kristall mit einer uniaxialen, tensilen Deformation $\varepsilon(x)$ und Oberflächenrelaxation $\varepsilon(z)$ betrachtet werden. Für die Deformation $\varepsilon(x)$ und zugehörige Verschiebung $u_x(x)$ wird dazu das gleiche Modell verwendet wie bereits zur Veranschaulichung der geometrischen Phase am Elementargitter in Abschnitt 4.3.2, d.h. $\varepsilon(x)$ wird durch Gleichung (4.16), $u_x(x)$ durch Gleichung (4.17) beschrieben. Für die Oberflächenrelaxation wird weiterhin das Modell der linearen Relaxation mit den Gleichungen (4.55) für $\varepsilon(z)$ und (4.56) für $u_z(z)$ verwendet. Das vollständige Verschiebungsfeld im Kristallgitter soll folgende Form besitzen:

$$u(x, z) = u_x(x)(1 + u_z(z)). \quad (4.57)$$

Dieser Ansatz für $u(x, z)$ stellt einerseits sicher, dass für $d < z < t - d$ ausschließlich die Verschiebung $u_x(x)$ vorliegt, weil dort $u_z(z) = 0$ ist. In den relaxierten Schichten, für $z \leq d$ und $t - d \leq z < t$, wird wegen $\varepsilon(x) = \partial u(x, z)/\partial x = (1 + u_z(z)) \partial u_x(x)/\partial x$ der Wert der uniaxialen, tensilen Deformation proportional zur Oberflächenrelaxation $u_z(z)$ vergrößert.

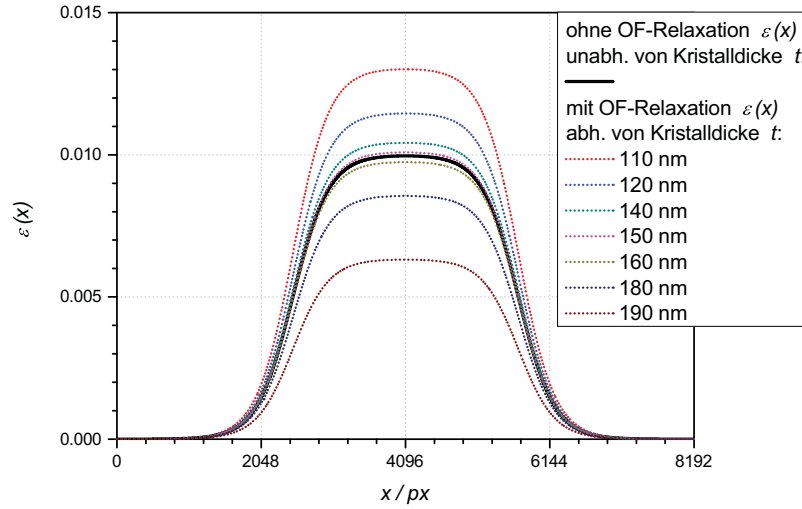


Abbildung 4.10: Beispiel für den Einfluss der Oberflächenrelaxation (Modell aus Abbildung 4.9; Dicke der Relaxationsschichten $d = 10$ nm) für eine uniaxiale Deformation $u(x)$ (Modell aus Abschnitt 4.3.2; x -Achse in Einheit Pixel) simuliert für die (220)-Beugungswelle (Extinktionsdicke $\xi_g = 99$ nm) und verschiedene Kristalldicken t .

Andererseits erfüllt der Ansatz wegen $\varepsilon(z) = \partial u(x, z) / \partial z = \partial u_z(z) / \partial z$ Gleichung (4.55). Somit ist die geometrische Phase proportional zu:

$$\varphi_g \sim u_x(x) \left[1 + \int_0^t f_u^g(z) u_z(z) dz \right]. \quad (4.58)$$

Da das Integral über die Gewichtung $f_u^g(z)$ und den Anteil der Oberflächenrelaxation $u_z(z)$ sowohl positive wie auch negative Werte annehmen kann (vgl. Abbildung 4.9), wird die uniaxiale Verschiebung $u_x(x)$ je nach Objektdicke t und Dicke d der relaxierten Schichten vergrößert oder verkleinert. Um dies zu illustrieren, zeigt Abbildung 4.10 Verläufe für die uniaxiale Deformation $\varepsilon(x) \sim \partial \varphi_g / \partial x$, berechnet mit Gleichung (4.58) für die (220)-Beugungswelle (Extinktionsdicke $\xi_g = 99$ nm). Dabei wurde angenommen, dass die Relaxationsschichten eine Dicke von je $d = 10$ nm besitzen. Für verschiedene Kristalldicken t erreicht $\varepsilon(x)$ unterschiedliche Maximalwerte. Für Dicken $t = 110$ nm und $t = 190$ nm nahe ganzzahligen Vielfachen der Extinktionsdicke betragen die Abweichungen vom idealen Verlauf ohne Oberflächenrelaxation $\Delta\varepsilon = \pm 0,003$, was einer relativen Abweichung $\Delta\varepsilon/\varepsilon \approx \pm 30\%$ entspricht. Für $t = 120$ nm und $t = 180$ nm betragen die relativen Abweichungen noch $\Delta\varepsilon/\varepsilon \approx \pm 10\%$. Nur im Bereich von halben Vielfachen der Extinktionsdicke ist die Abweichung $\Delta\varepsilon/\varepsilon \lesssim \pm 5\%$. Für $t < 3\xi_g/2$ wird $\varepsilon(x)$ im Vergleich zum idealen Verlauf vergrößert, für $t > 3\xi_g/2$ verkleinert. Leider besitzt eine weitergehende quantitative Auswertung nur eine geringe Aussagekraft für experimentelle Ergebnisse, da der tatsächliche Verlauf und Wert $\varepsilon(z)$ der Oberflächenrelaxation in experimentellen TEM-Proben im allgemeinen unbekannt ist. Die Beispiele in Abbildung 4.9 und 4.10 illustrieren jedoch, dass der Einfluss der Oberflächenrelaxation durchaus beträchtlich sein kann. Eine erste experimentelle Überprüfung der Theorie an einem SiGe-Vielschichtsystem wurde erst kürzlich von JAVON *et al.* (2014) veröffentlicht und bestätigt die von der Theorie vorhergesagten Effekte qualitativ.

Obwohl die Größe der Abweichung für jede TEM-Probe spezifisch ist, lassen sich dennoch einige allgemeine Aussagen hinsichtlich Probendicke und -präparation treffen. Erstens sollte nicht in der Nähe von ganzzahligen Vielfachen der Extinktionsdicke gemessen werden, was auch aus Gründen der Signaloptimierung nicht zu empfehlen ist. Statt dessen ist es besser, TEM-Proben auf $(n + 1/2)$ -fache der Extinktionsdicke zu präparieren. Zweitens sollte bei der Präparation auf eine möglichst geringe Schädigung der Oberflächen geachtet werden, damit die Dicke d der Relaxationsschicht und damit der Einfluss der Oberflächenrelaxation klein bleibt. Darüber hinaus bietet es sich an, die experimentell bestimmten Werte für die Deformation mit einer Simulation zu vergleichen. Hierbei steht man jedoch wieder vor dem Dilemma, dass man die Oberflächenrelaxation in der Simulation nur schwer berücksichtigen können, da man deren konkreten Verlauf und Größe nicht kennt. Alternativ kann man die experimentellen Ergebnisse mit einer Simulation für den Bulk-Wert vergleichen, was sinnvoll ist, weil man diesen ja durch das Experiment zu bestimmen versucht. Abweichungen des Experiments vom Bulk-Wert lassen sich dann auf Oberflächenrelaxation zurückführen; dies ist das übliche vorgehen. Vergleiche von Messungen und Simulationen im experimentellen Teil dieser Arbeit zeigen dabei eine gute Übereinstimmung zwischen den gemessenen Werten und Bulk-Werten. Vermutlich trägt eine sorgfältiger Probenpräparation dazu bei, den Einfluss der Oberflächenrelaxation zu unterdrücken und eine allzu deutliche Verfälschung des Messergebnisses zu vermeiden. Als Fazit lässt sich hier nur ziehen: Verspannte Transistorstrukturen eignen sich aufgrund ihres z -unabhängigen Deformationsfeldes besonders gut für die Deformationsbestimmung aus der Phase der Beugungswellen. Der Einfluss von Oberflächenrelaxation sollte aber bei der Interpretation der Messergebnisse nicht außer Acht gelassen werden, insbesondere wenn die experimentellen Ergebnisse stark von der Simulation für den Bulk abweichen.

4.4 Zusammenfassung

In diesem Kapitel wurden zunächst zwei wichtige Abbildungsmodi zur Untersuchung von Kristallen im TEM vorgestellt. Bei der Hellfeldabbildung wird die Intensität der ungebeugten Welle aufgezeichnet, bei der Dunkelfeldabbildung die Intensität einer ausgewählten Beugungswelle. Die Entstehung von Beugungswellen wurde durch Streuung der einfallenden Elektronenwellen an parallelen Netzebenen des Kristallgitters erklärt. Die geometrische Beschreibung der Streuung mittels Bragg- und Laue-Bedingung erlaubte, die Wellenfunktion der Beugungswelle in Abhängigkeit vom reziproken Gittervektor \mathbf{g} auszudrücken. Eine Deformation des Kristallgitters ändert die geometrische Anordnung der Gitterpunkte, wodurch die Beugungswelle eine geometrische Phasenschiebung $\varphi_g = -2\pi \mathbf{g} \cdot \mathbf{u}$ erfährt, die proportional zur Verschiebung der Gitterpunkte \mathbf{u} und dem reziproken Gittervektor \mathbf{g} ist. Die Beugung am Kristallgitter wurde zunächst in rein kinematischer Näherung betrachtet. Am Beispiel des Kosinusgitters wurde demonstriert, wie aus der Phase der Beugungswelle Verschiebung und Deformation des Kristallgitters gemessen werden können. Anschließend wurde die geometrische Phase formal korrekt aus der Streuung der einfallenden Elektronenwelle am dem deformierten Potential des Kristallgitters mit der Schrödinger-Gleichung abgeleitet. So ergab sich im Zweistrahlfall eine Näherungslösung für die geometrische Phase, wenn das Verschiebungsfeld in Durchstrahlungsrichtung nicht konstant ist. Die geometrische Phase entsprach einer gewichteten Projektion über das z -abhängige Verschiebungsfeld, wobei die Wichtung aus Störung der Amplituden im Zweistrahlfall durch das z -abhängige Verschiebungsfeld $u(z)$ erklärt wurde. Für den Fall einer in Durchstrahlungsrichtung

konstanten Verschiebung ging die Lösung der geometrische Phase in dynamischer Streuung in die bereits diskutierte Lösung in kinematischer Näherung über; die geometrische Phase repräsentiert ausschließlich das zweidimensionale Verschiebungsfeld $u(x, y)$. Bei einem z -abhängigen Verschiebungsfeld enthält die geometrische Phase aufgrund der gewichteten Projektion zusätzlich Information über die z -abhängige Verschiebung. Ein Rückschluss auf den zweidimensionalen Verschiebungsfeld ist nicht ohne weiteres möglich. Verspannte Transistorstrukturen besitzen jedoch im allgemeinen ein in z -Richtung konstantes Verschiebungsfeld, was es tatsächlich erlaubt, die Deformation aus der geometrischen Phase der Beugungswelle zu bestimmen. Abschließend wurde der Einfluss von Oberflächenrelaxation diskutiert, die wie ein z -abhängiges Verschiebungsfeld wirken kann. Dabei wurde abgeschätzt, dass die relativen Abweichungen in der Deformationsmessung theoretisch bis zu 30 % betragen können.

5 Spezialverfahren

der Dunkelfeld off-axis Elektronenholographie

Die Methode der Dunkelfeld off-axis Elektronenholographie (DFH) im Transmissionselektronenmikroskop (TEM) wurde 1981 von Karl-Josef Hanszen erstmals beschrieben (HANSZEN *et al.* 1981). Hanszen hatte erkannt, dass jede an einem Kristall gebeugte Welle die Information über die laterale Position der Atome im Kristallgitter als Phasenfaktor trägt. Die Dunkelfeld-Holographie erlaubte ihm, die komplette Beugungswelle in Amplitude und Phase aufzuzeichnen, und somit an die Information über Störungen in der Geometrie des Kristallgitters zu gelangen. Er nutzte seine Erkenntnisse zur Beobachtung des Versetzungsparameters an einem Stapelfehler in einem Kristallkeil aus Silizium (HANSZEN 1986).

Mehr als ein Jahrzehnt später erkannte Martin Hÿtch erneut die Möglichkeit, aus der Phase der Beugungswelle Informationen über lokale Störungen im Kristallgitter zu gewinnen (HÛTCH *et al.* 1998; HÛTCH und PLAMANN 2001). Eine neue Anwendungsmöglichkeit ergab sich mit der Bestimmung der Gitterverspannungen in Halbleiterbauelementen oder anderen funktionellen Materialien, wie Ferroelektrika, CNTs, etc. Zunächst versuchte er, die Phase der Beugungswelle aus dem Spektrum von hochaufgelösten TEM-Aufnahmen zu rekonstruieren (Geometrische Phasenanalyse). Jedoch hat dieser Ansatz zwei Nachteile: Das Gesichtsfeld der rekonstruierten Phase ist auf das Gesichtsfeld der HRTEM-Aufnahme begrenzt, typischer Weise einige 10 nm, und das Signal-Rausch-Verhältnis der rekonstruierten Phase ist im Allgemeinen sehr gering. Beides stellt eine erhebliche Einschränkung für die exakte Messung von Gitterverspannungen in Halbleiterbauelementen dar (HÛTCH *et al.* 2008). Auf der Suche nach einer alternativen Methode entdeckte er die Dunkelfeld-Holographie wieder, um sie erstmals zur Spannungsmessung in Halbleiterbauelementen anzuwenden (HÛTCH *et al.* 2008). Endlich konnten großflächig in der Gitterkonstante modulierte Bereiche des Kristallgitters mit hoher Auflösung und gutem Signal-Rausch-Verhältnis untersucht werden. Christoph Koch stellte 2010 in Ergänzung zur Dunkelfeld off-axis Elektronenholographie das Verfahren der Dunkelfeld in-line Elektronenholographie vor (KOCH *et al.* 2010).

Dieses Kapitel beschreibt zunächst das Grundprinzip der DFH: Aufbau, Aufnahme und Rekonstruktion eines DF-Hologramms sowie die Ableitung der Gitterdeformation aus der rekonstruierten Phase der Beugungswelle. Anschließend widmet sich das Kapitel verschiedenen methodischen Aspekten der DFH. Zunächst gilt es, den Aufbau der DFH an die vorhandene instrumentelle Ausstattung des *Speziallabor Trieben* so anzupassen, dass die Vorgaben der Halbleiterindustrie an Lateral- und Signalauflösung für eine Deformationsmessung erfüllt werden. Dabei werden auch instrumentelle Grenzen diskutiert. Bei der Aufnahme von DF-Hologrammen entstehen Artefakte, wie fehlerhafte Pixel und Fresnelbeugung am Biprisma, die vor der Rekonstruktion korrigiert werden müssen. Der Einfluss der Projektiv- und Kameraverzeichnungen auf die Deformationsmessung wird diskutiert, und es werden Korrekturmöglichkeiten aufgezeigt. Ein Abschnitt widmet sich der numerischen Ableitung der Deformationskarte und diskutiert die Propagation des Rauschens von der rekonstruierten Phase in die Deformationskarte. Anschließend erläutert ein Vergleich zwischen der Aufnahme von DF-Hologrammen mit langer Belichtungszeit oder

der Aufzeichnung und Rekonstruktion einer Dunkelfeldhologrammserie, wie das Rauschen in der Deformationskarte gesenkt werden kann. Durch eine Zweistrahlbedingung lässt sich die Intensität in der abgelenkten Welle steigern und es können Vorgaben für die optimale Objektdicke abgeleitet werden. Dabei wird auch der Einfluss der Objektkippung auf die Deformationsmessung untersucht. Abschließend werden Einflüsse der Probenpräparation diskutiert.

5.1 Aufnahme von Dunkelfeldhologrammen

5.1.1 Voraussetzungen

Da die Dunkelfeld off-axis Elektronenholographie eine spezielle Art der off-axis Elektronenholographie darstellt, gelten für die Aufnahme von DF-Hologrammen die gleichen Voraussetzungen wie für die Aufnahme von Hellfeldhologrammen. Zu aller erst muss das TEM über eine Feldemissionsquelle (FEG) verfügen, da nur so eine kohärente Beleuchtung mit ausreichender Intensität zur Verfügung steht. Des weiteren muss das TEM mit einem elektronenoptischen Biprisma im Blendenhalter der Feinbereichsbeugungsblende ausgestattet sein. Speziell für die Dunkelfeldholographie an Transistorstrukturen sollte das TEM neben der Objektivlinse über eine Lorentz Linse verfügen, um die zur Untersuchung von Halbleiterbauelementen benötigten großen Gesichtsfelder bei entsprechend niedrigeren Auflösungen zu erzielen. Alternativ kann, wie in der vorliegenden Arbeit, auch die Transferoptik eines Cs-Korrektors als Pseudo-Lorentz Linse benutzt werden.

5.1.2 Versuchsaufbau

Abbildung 5.1 stellt den Versuchsaufbau zur Aufnahme von Dunkelfeld off-axis Elektronenhologrammen schematisch dar. Der Aufbau kombiniert die Dunkelfeldabbildung mit dem Strahlengang der off-axis Elektronenholographie im TEM (MÖLLENSTEDT und WAHL 1968; WAHL 1975) und wurde erstmals von Karl-Josef Hanßen realisiert (HANSZEN *et al.* 1981).

Eine ebene Elektronenwelle mit dem Wellenvektor $\mathbf{K}_0 = (k_{0x}, k_{0y}, k_{0z})^T$ trifft auf einen Kristall in der Objektebene. Aufgrund einer leichten Deformation $\varepsilon = (a_{roi} - a_{ref})/a_{ref} \ll 1$ besteht der Kristall aus zwei Bereichen. Auf der einen Seite befindet sich der Referenzbereich A mit der Gitterkonstanten $a_{ref} = 1/g_{ref}$. Auf der anderen Seite befindet sich der Kristallbereich B mit der gegenüber dem Referenzbereich A leicht verschiedenen Gitterkonstanten $a_{roi} = 1/g_{roi}$. Da sich somit die Beugungsbedingungen in den Kristallbereichen leicht voneinander unterscheiden, besteht die Beugungswelle in der Austrittsebene des Kristalls aus zwei Teilwellen. Die Teilwelle

$$\psi_{ref}(\mathbf{r}) = A_{ref}(\mathbf{r}) e^{2\pi i(\mathbf{k}_0 + \mathbf{g}_{ref}) \cdot \mathbf{r}} \quad (5.1)$$

mit dem Wellenvektor $\mathbf{k}_0 + \mathbf{g}_{ref}$ entsteht durch Beugung im Referenzbereich A. Dagegen stammt die Teilwelle

$$\psi_{roi}(\mathbf{r}) = A_{roi}(\mathbf{r}) e^{2\pi i(\mathbf{k}_0 + \mathbf{g}_{roi}) \cdot \mathbf{r}} \quad (5.2)$$

mit dem Wellenvektor $\mathbf{k}_0 + \mathbf{g}_{roi}$ aus dem deformierten Kristallbereich B. Hierbei bezeichnet $\mathbf{r} = (x, y)^T$ den zweidimensionalen Ortsvektor in den zur Austrittsebene konjugierten Ebenen. Die Bedeutung der Vektoren im reziproken Raum erläutert Abbildung 5.2. $\mathbf{k}_0 = (k_{0x}, k_{0y})^T$ bezeichnet die in-plane Komponente von \mathbf{K}_0 . Die reziproken Gittervektoren \mathbf{g}_{ref} und \mathbf{g}_{roi} liegen in der Ebene parallel zur Austrittsebene. A_i beschreibt die Amplitude der Teilwellen aus den Bereichen A und B.

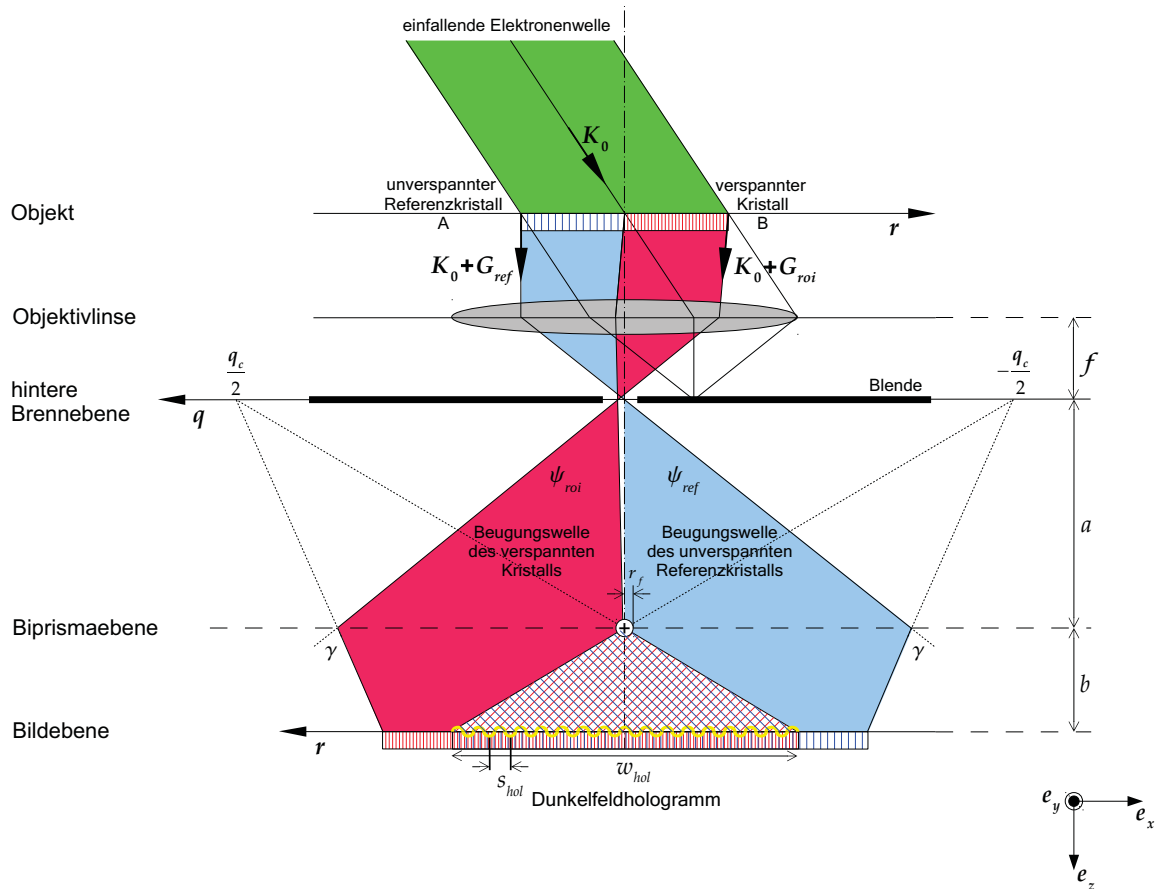


Abbildung 5.1: Experimenteller Aufbau der Dunkelfeld-off-axis Elektronenholographie. Die abgebeugte Welle aus dem verspannten Kristall und dem Referenzkristall wird mit Hilfe einer Blende in der hinteren Brennebene von den anderen Beugungswellen getrennt. Mit dem Biprisma werden die beiden Teilwellen in der Bildebene überlagert und ein Dunkelfeld-Hologramm aufgezeichnet.

Tatsächlich werden im Experiment Beleuchtung und Kristall derart verkippt, dass eine Zweistrahlbedingung für die gewählte Beugungsordnung erfüllt ist und gleichzeitig der gebeugte Strahl entlang der optischen Achse verläuft. Dadurch lässt sich einerseits die Intensität in der gebeugten Welle erhöhen (Abschnitt 5.11) und andererseits der Einfluss von Aberrationen vermindern (Abschnitt 5.3.4.1).

Die Objektlinse bildet das Objekt in die erste Zwischenbildebene ab. In der hinteren Brennebene der Objektlinse erhält man zunächst das Spektrum des Kristalls. Eine um die optische Achse zentrierte Blende erlaubt, die Beugungswelle von der ungebeugten Welle zu trennen. So trägt einzig die ausgewählte, aus den beiden Teilwellen bestehende Beugungswelle zur weiteren Abbildung bei.

Das Elektronenbiprisma (MÖLLENSTEDT und DÜKER 1956) erlaubt, die Teilwellen $\psi_{ref}(r)$ und $\psi_{roi}(r)$ in der Zwischenbildebene zu überlagern. Es besteht aus einem goldbedampften Quarzglasfaden, der in die Halterung der Feinbereichsbeugungsblende eingebaut ist. Sobald man eine positive Spannung U_F an den Biprismafaden angelegt, werden die beiden Teilwellen im elektrischen Feld des Strahlteilers um den Winkel

$$\gamma = \gamma_0 U_F \quad (5.3)$$

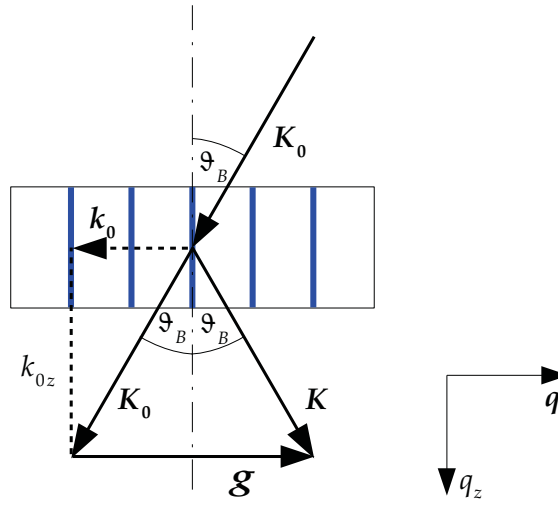


Abbildung 5.2: Erläuterung der Bezeichnungen in den Teilwellen (5.1) und (5.2): $\mathbf{K}_0 = (k_{0x}, k_{0y}, k_{0z})^T$ bezeichnet den Wellenvektor der einfallenden Elektronenwelle, $\mathbf{k}_0 = (k_{0x}, k_{0y})^T$ dessen in-plane Komponente parallel und k_{0z} dessen out-of-plane Komponente senkrecht zur Austrittsfläche des Kristalls. Der reziproke Gittervektor $\mathbf{g} = (g_x, g_y)^T$ liegt in der Ebene parallel zur Austrittsfläche, d.h. $\mathbf{G} = (g_x, g_y, 0)^T = (g, 0)^T$. ϑ_B ist der Bragg-Winkel.

abgelenkt, wobei sich die Konstante γ_0 aus der Geometrie des Strahlteilers ergibt. Die Teilwelle $\psi_{ref}(\mathbf{r})$ aus dem Referenzbereich A und die Teilwelle $\psi_{roi}(\mathbf{r})$ aus dem deformierten Kristallbereich B werden vom Biprisma zueinander abgelenkt. Es ergeben sich die gekippten Teilwellen

$$\psi_{ref}(\mathbf{r}) = A_{ref}(\mathbf{r}) e^{2\pi i(\mathbf{k}_0 + \mathbf{g}_{ref}) \cdot \mathbf{r}} e^{-2\pi i \frac{q_c}{2} \cdot \mathbf{r}} \quad (5.4)$$

und

$$\psi_{roi}(\mathbf{r}) = A_{roi}(\mathbf{r}) e^{2\pi i(\mathbf{k}_0 + \mathbf{g}_{roi}) \cdot \mathbf{r}} e^{2\pi i \frac{q_c}{2} \cdot \mathbf{r}}, \quad (5.5)$$

die kohärent überlagert werden und in der Zwischenbildebene ein stationäres Interferenzmuster mit der Intensitätsverteilung

$$\begin{aligned} I_{hol}(\mathbf{r}) &= |\psi_{roi}(\mathbf{r}) \psi_{ref}(\mathbf{r})|^2 \\ &= A_{roi}(\mathbf{r})^2 + A_{ref}(\mathbf{r})^2 + 2\mu(\mathbf{q}_c) A_{roi}(\mathbf{r}) A_{ref}(\mathbf{r}) \\ &\quad \times \cos \left[2\pi \mathbf{q}_c \cdot \mathbf{r} + 2\pi (\mathbf{g}_{roi} - \mathbf{g}_{ref}) \cdot \mathbf{r} \right]. \end{aligned} \quad (5.6)$$

erzeugen. Dieses kosinusförmige Interferenzmuster wird als Dunkelfeld off-axis Elektronenhologramm (DF-Hologramm) bezeichnet. Es besitzt eine lokale Modulation der Intensität durch die Amplituden $A_{ref}(\mathbf{r})$ bzw. $A_{roi}(\mathbf{r})$ und eine ortsabhängige Verschiebung der Interferenzstreifen durch die Phasendifferenz

$$\varphi_g(\mathbf{r}) = 2\pi (\mathbf{g}_{roi} - \mathbf{g}_{ref}) \cdot \mathbf{r} \quad (5.7)$$

zwischen der Teilwelle des Referenzkristalls A und der Teilwelle des deformierten Kristallbereichs B. Die Raumfrequenz \mathbf{q}_c heißt Trägerfrequenz des Hologramms. Der Faktor $\mu(\mathbf{q}_c)$ beschreibt die ortsunabhängige Kontrastdämpfung der Interferenzstreifen.

Abbildung 5.3a zeigt ein Beispiel für ein (220)-Dunkelfeldhologramm an einer Transistorstruktur, die durch eingebettetes SiGe an Source und Drain verspannt ist.

5.1.3 Rekonstruktion der Beugungswelle

Die Beugungswelle lässt sich mittels Fouriertransformation aus dem Hologramm (5.6) gewinnen. Dabei erfolgt die Rekonstruktion der Beugungswelle nach dem gleichen Prinzip wie die Rekonstruktion der Bildwelle in der Hellfelddholographie (LEHMANN und LICHT 2002). Man erhält das Spektrum mit dem Zentralband und den beiden konjugiert komplexen Seitenbändern (Abbildung 5.3)b:

$$\begin{aligned}
 \mathcal{FT}\{I_{hol}\} &= \mathcal{FT}\{A_{roi}^2 + A_{ref}^2\} && \text{Zentralband} \\
 &+ \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}_0) \otimes \mathcal{FT}\{A_{roi}A_{ref}\mu(\mathbf{q}_c) \exp[+i\varphi_g(\mathbf{r})]\} && \text{Seitenband } +1 \\
 &+ \delta(\mathbf{q} + \mathbf{q}_0) \otimes \mathcal{FT}\{A_{roi}A_{ref}\mu(\mathbf{q}_c) \exp[-i\varphi_g(\mathbf{r})]\} && \text{Seitenband } -1,
 \end{aligned} \tag{5.8}$$

Die Seitenbänder entsprechen der komplexen Beugungswelle und tragen die vollständige Information über die Beugungswelle in Amplitude und Phase. Das Seitenband +1 wird mit einer Maske ausgeschnitten und zentriert. Nach inverser Fouriertransformation erhält man die komplexe Beugungswelle (Abbildung 5.3)c:

$$\begin{aligned}
 \psi_g(\mathbf{r}) &= \mathcal{FT}^{-1}\{\text{Seitenband } +1\} \\
 &= \mathcal{FT}^{-1}\{\mathcal{FT}\{A_{roi}A_{ref}\mu(\mathbf{q}_c) \exp[+i\varphi_g(\mathbf{r})]\}\} \\
 &= A_{roi}A_{ref}\mu(\mathbf{q}_c) \exp[+i\varphi_g(\mathbf{r})].
 \end{aligned} \tag{5.9}$$

Zur Bestimmung der Deformation ε_g aus der rekonstruierten Phase φ_g ist es sinnvoll, ein *phaseunwrapping* durchzuführen. Bei der numerischen Rekonstruktion des DF-Hologramms erfolgt die Berechnung der Phase mit Hilfe der Arkustangensfunktion. Da \arctan nur im Intervall $[-\pi, \pi]$ definiert ist, werden Phasen außerhalb des Intervalls als modulo 2π dargestellt. Dies nennt man *phase wrapping*. Da die Deformation aus der Ableitung der Phase bestimmt wird, würde auch diese Unstetigkeit in der Ableitung zu Artefakten in der Deformationskarte führen. Es existieren verschiedene Algorithmen, um die Phase mit einem kontinuierlichen Verlauf (*unwrapped*) darzustellen (GOLDSTEIN *et al.* 1988; FLYNN 1997).

5.2 Bestimmung der Gitterdeformation

5.2.1 Gitterdeformation in \mathbf{g}_{ref} -Richtung

Die Deformation ε_{gg} des Kristallgitters in die Richtung des reziproken Gittervektors \mathbf{g}_{ref} kann recht einfach aus der rekonstruierten Phase (5.9) bestimmt werden. Gemäß Abschnitt 4.3.1 besitzt die rekonstruierte Phase der Beugungswelle die allgemeine Form:

$$\varphi_g(\mathbf{r}) = -2\pi\mathbf{g}_{ref} \cdot \mathbf{u}(\mathbf{r}), \tag{5.10}$$

mit dem Verschiebungsvektor $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ und dem reziproken Gittervektor \mathbf{g}_{ref} im undeformierten Referenzkristall. Somit erlaubt die Phase $\varphi_g(\mathbf{r})$, nur die Komponente der Verschiebung $u_g(\mathbf{r})$ in der Richtung parallel zu \mathbf{g}_{ref} zu messen:

$$\varphi_g(\mathbf{r}) = -2\pi\mathbf{g}_{ref} \cdot \mathbf{u}_g(\mathbf{r}). \tag{5.11}$$

Die Komponente der Deformation ε_{gg} in dieser Richtung ergibt sich nach Abschnitt 2.1 aus der Ableitung der Verschiebung und somit aus dem Gradienten der Phase in der Richtung

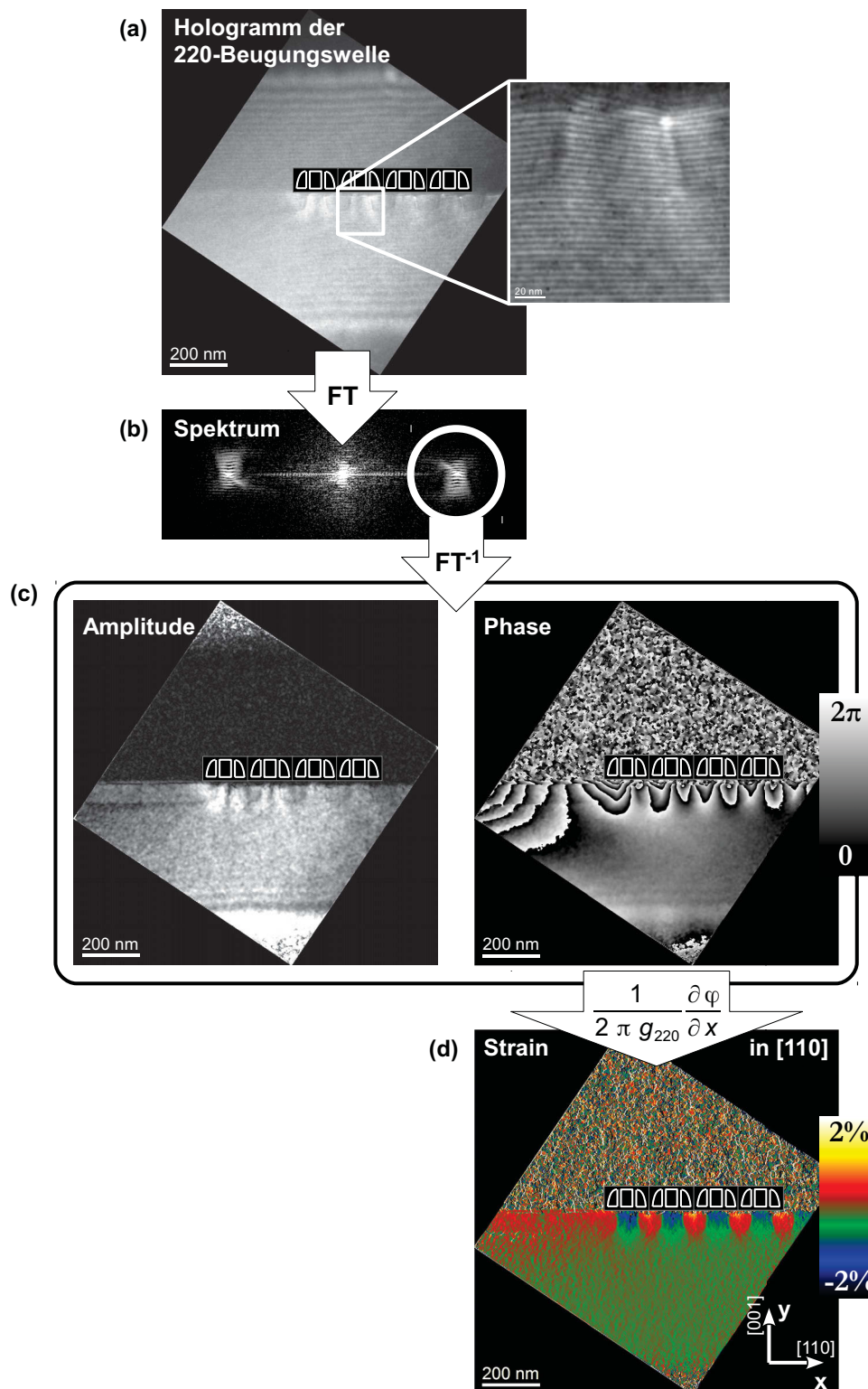


Abbildung 5.3: Rekonstruktion der (220)-Beugungswelle aus einem Dunkelfeldhologramm einer mit SiGe verspannten Transistorstruktur mittels Fourieranalyse. Die Transistoren sind als Gatekontakt mit Spacern links und rechts stilisiert. a) Aus dem DF-Hologramm wird durch Fouriertransformation das Spektrum berechnet. b) Aus dem Spektrum wird das Seitenband +1 ausgeschnitten, zentriert und eine inverse Fouriertransformation durchgeführt. c) Man erhält die komplexe (220)-Beugungswelle in Amplitude und Phase. d) Nach Ableiten der Phase in der [110]-Richtung und Division durch den (220)-Gitterparameter, erhält man die Spannungsverteilung bezüglich der [110]-Gitterrichtung.

von \mathbf{g}_{ref} :

$$\varepsilon_{gg} = \nabla_g u_g(\mathbf{r}) = -\frac{1}{2\pi|\mathbf{g}_{ref}|} \nabla_g \varphi_g(\mathbf{r}). \quad (5.12)$$

Hierbei bezeichnet ∇_g die Ableitung in Richtung von \mathbf{g}_{ref} bzw. dessen Einheitsvektor \mathbf{e}_g :

$$\nabla_g = \frac{\mathbf{g}_{ref}}{|\mathbf{g}_{ref}|} \cdot \nabla = \mathbf{e}_g \cdot \nabla. \quad (5.13)$$

Für die rekonstruierte Phase aus Gleichung (5.9) beträgt der Gradient:

$$\nabla_g \varphi_g(\mathbf{r}) = 2\pi(\mathbf{g}_{roi} - \mathbf{g}_{ref}) \cdot \mathbf{e}_g = 2\pi(g_{roi} - g_{ref}). \quad (5.14)$$

Dabei besitzen die reziproken Gittervektoren \mathbf{g}_{roi} und \mathbf{g}_{ref} die selbe Richtung \mathbf{e}_g , jedoch unterscheiden sich ihre Beträge aufgrund der Gitterverzerrung, die parallel zu den beiden Vektoren wirkt. Weil der Gradient der rekonstruierten Phase in Gleichung (5.14) proportional zur linearen Längenänderung der reziproken Gitterkonstanten $g_{roi} - g_{ref}$ ist, erhält man mit Gleichung (5.12) für die Deformation in Richtung von \mathbf{g}_{ref} :

$$\varepsilon_{gg} = -\frac{g_{roi} - g_{ref}}{g_{ref}}. \quad (5.15)$$

Anstatt der reziproken Gittervektoren kann man wie in Abschnitt 2.1 die eindimensionale Deformation ε_{gg} in Richtung von \mathbf{g}_{ref} auch im Realraum über die lineare Längenänderung der Gitterkonstanten $a_{roi} = 1/g_{roi}$ des ungestörten Kristalls gegenüber der Gitterkonstanten $a_{ref} = 1/g_{ref}$ des deformierten Kristalls ausdrücken:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{gg} &= \frac{a_{roi} - a_{ref}}{a_{ref}} = \frac{1/g_{roi} - 1/g_{ref}}{1/g_{ref}} \\ &= \frac{g_{ref}(g_{ref} - g_{roi})}{g_{roi} g_{ref}} \approx \frac{g_{ref} - g_{roi}}{g_{ref}} = -\frac{g_{roi} - g_{ref}}{g_{ref}}. \end{aligned} \quad (5.16)$$

Dabei wurde ausgenutzt, dass nur kleine Deformationen im Kristallgitter vorliegen: $|a_{roi} - a_{ref}| \ll 1$ bzw. $|g_{ref} - g_{roi}| \ll 1$. Somit stimmt die Beschreibung der Deformation im reziproken Raum in Gleichung (5.16) näherungsweise mit der Beschreibung im Realraum in Gleichung (5.15) überein.

Abbildung 5.3 zeigt die Rekonstruktion der (220)-Beugungswelle an einer Transistorstruktur auf einem (1 $\bar{1}$ 0)-Wafer. Die zweidimensionale Karte der Gitterverspannung ε_{110} in Abbildung 5.3d ergibt sich durch Ableiten der rekonstruierten Phase entlang der [110]-Richtung.

5.2.2 Gitterdeformation in (x, y)-Ebene

Möchte man den Deformationstensor ε_{ij} mit all seinen Komponenten ε_{xx} , ε_{yy} und ε_{xy} in der (x, y)-Ebene bestimmen, benötigt man den vollständigen Verschiebungsvektor $\mathbf{u}(\mathbf{r}) = (u_x, u_y)^T$ in dieser Ebene (HÛTCH *et al.* 1998). Er lässt sich aus den Phasen $\varphi_{g1}(\mathbf{r})$ und $\varphi_{g2}(\mathbf{r})$ von zwei Beugungswellen konstruieren, wobei die zugehörigen Gittervektoren

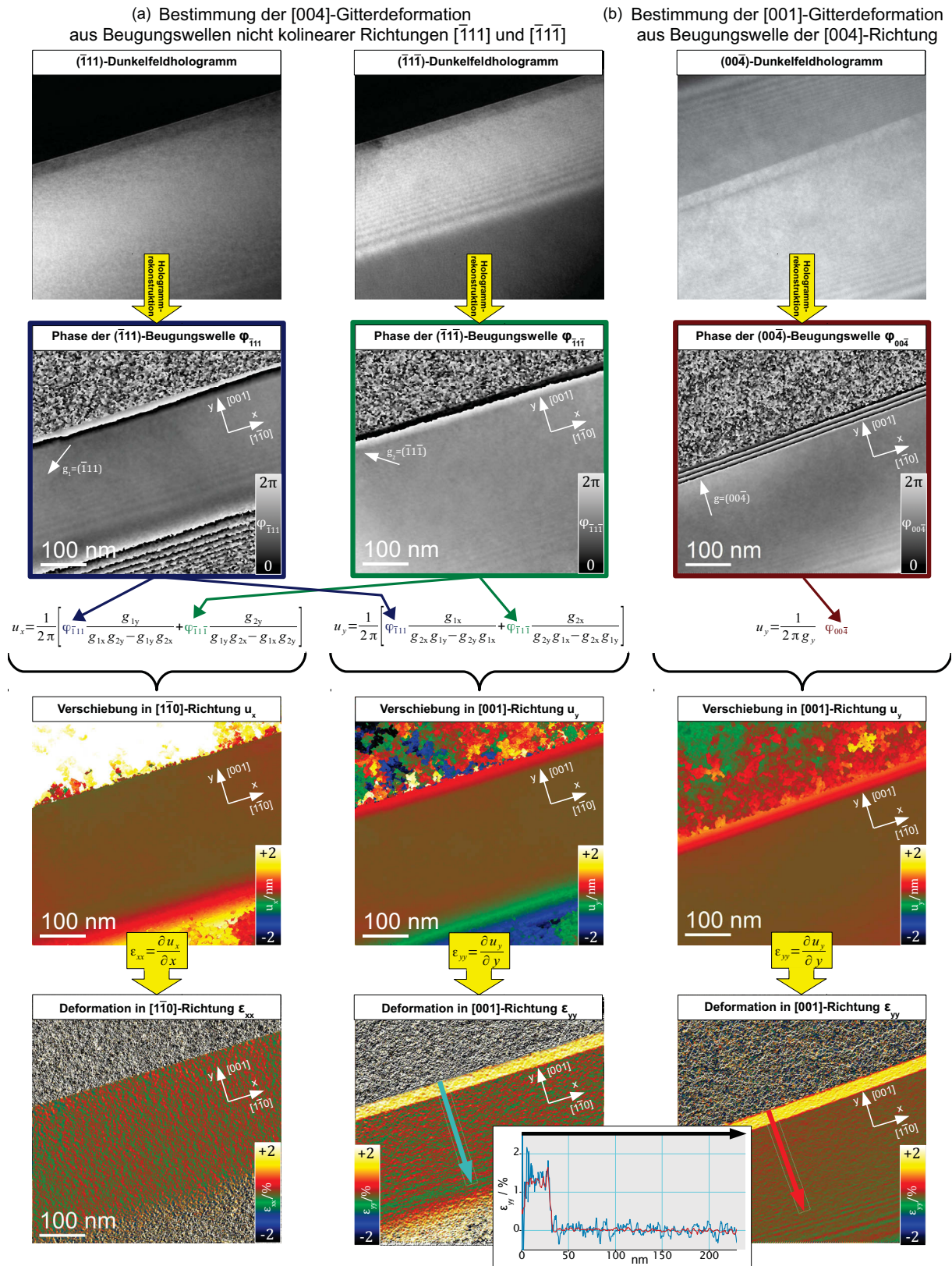


Abbildung 5.4: a) Phasen von Beugungswellen linear unabhängiger Richtungen $[\bar{1}11]$ und $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$ erlauben, $[\bar{1}\bar{1}0]$ - und $[001]$ -Gitterdeformation gleichzeitig zu bestimmen. b) Die Phase der $[004]$ -Beugungswelle liefert ausschließlich die $[001]$ -Gitterdeformation.

$\mathbf{g}_1 = (g_{1x}, g_{1y})^T$ und $\mathbf{g}_2 = (g_{2x}, g_{2y})^T$ linear unabhängig sein müssen:

$$\begin{aligned}\varphi_{g_1}(x, y) &= -2\pi \mathbf{g}_1 \cdot \mathbf{u}(x, y) \\ &= -2\pi [g_{1x}u_x(x, y) + g_{1y}u_y(x, y)],\end{aligned}\quad (5.17)$$

und

$$\begin{aligned}\varphi_{g_2}(x, y) &= -2\pi \mathbf{g}_2 \cdot \mathbf{u}(x, y) \\ &= -2\pi [g_{2x}u_x(x, y) + g_{2y}u_y(x, y)].\end{aligned}\quad (5.18)$$

Die beiden Gleichungen lassen sich in Matrixschreibweise zusammenfassen:

$$\begin{pmatrix} \varphi_{g_1} \\ \varphi_{g_2} \end{pmatrix} = -2\pi \begin{pmatrix} g_{1x} & g_{1y} \\ g_{2x} & g_{2y} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_x \\ u_y \end{pmatrix}.\quad (5.19)$$

Nach Invertieren der Gleichung erhält man den Verschiebungsvektor:

$$\mathbf{u}(x, y) = \begin{pmatrix} u_x \\ u_y \end{pmatrix} = -\frac{1}{2\pi} \begin{pmatrix} g_{1x} & g_{1y} \\ g_{2x} & g_{2y} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \varphi_{g_1} \\ \varphi_{g_2} \end{pmatrix} = -\frac{1}{2\pi} \begin{pmatrix} g_{1x} & g_{2x} \\ g_{1y} & g_{2y} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi_{g_1} \\ \varphi_{g_2} \end{pmatrix},\quad (5.20)$$

woraus sich die Bestimmungsgleichungen für die Komponenten $u_x(x, y)$ und $u_y(x, y)$ des Verschiebungsvektors als Kombination der beiden Phasen $\varphi_{g_1}(x, y)$ und $\varphi_{g_2}(x, y)$ ergeben:

$$\begin{aligned}u_x(x, y) &= -\frac{1}{2\pi} \left[\frac{g_{1y}}{g_{1x}g_{2y} - g_{1y}g_{2x}} \varphi_{g_1}(x, y) + \frac{g_{2y}}{g_{1y}g_{2x} - g_{1x}g_{2y}} \varphi_{g_2}(x, y) \right], \\ u_y(x, y) &= -\frac{1}{2\pi} \left[\frac{g_{1x}}{g_{2x}g_{1y} - g_{2y}g_{1x}} \varphi_{g_1}(x, y) + \frac{g_{2y}}{g_{1x}g_{2x} - g_{1y}g_{2y}} \varphi_{g_2}(x, y) \right].\end{aligned}\quad (5.21)$$

Somit können die Komponenten des Deformationstensors über die in Abschnitt 2.1 vorgestellte Gleichung (2.9) ausgewertet werden:

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right).\quad (5.22)$$

Abbildung 5.4 zeigt die Rekonstruktion der [001]-Gitterverspannung durch Kombination von $(\bar{1}11)$ - und $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$ -DF-Hologramm, sowie zum Vergleich durch direkte Rekonstruktion eines einzelnen $(00\bar{4})$ -DF-Hologramms. Als Testobjekt dient eine SiGe-Schicht mit 25 % Ge-Gehalt auf Si-Substrat. Aus den rekonstruierten Phasen $\varphi_{\bar{1}11}$ der $(\bar{1}11)$ - und $\varphi_{\bar{1}\bar{1}\bar{1}}$ der $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$ -Beugungswelle lassen sich mit Gleichung (5.21) die Verschiebungen u_x und u_y berechnen. Anschließend werden daraus die Gitterverspannungen ε_{xx} in [110]- und ε_{yy} in [001]-Richtung abgeleitet. In [110]-Richtung tritt keine Gitterverspannung auf, da aufgrund epitaktischen Wachstums der SiGe-Schicht in dieser Richtung die Gitterkonstante des Si-Substrats aufgezwungen wird. In [001]-Richtung jedoch besitzt das SiGe laut Vegard'schem Gesetz eine ca. 20 % größere Gitterkonstante als das Si-Substrat. Der Unterschied in den Gitterkonstanten lässt sich mit beiden Aufzeichnungsmethoden identisch beobachten, wobei für die SiGe-Schicht experimentell eine durchschnittliche Dehnung $\varepsilon_{yy} = 1,3\%$ bestimmt wird. Die Standardabweichung in der rekonstruierten Deformationskarte beträgt bei Kombination von $(\bar{1}11)$ - und $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$ -DF-Hologrammen $\sigma_{\varepsilon_{yy}} = \pm 0,2\%$, bei direkter Rekonstruktion aus dem $(00\bar{4})$ -DF-Hologramm nur $\sigma_{\varepsilon_{yy}} = \pm 0,05\%$. Es ist bei Kombination zweier Phasen größer, weil zwei verrauschte Phasen addiert werden. Aus methodischer Sicht bedeutet dieser Unterschied im Signalrauschen, dass wenn möglich die direkte

Bestimmung der Gitterdeformation aus einer Beugungswelle, welche in die Richtung der zu bestimmenden Deformation zeigt, der Kombination aus zwei linear unabhängigen Beugungswellen vorgezogen werden sollte.

5.3 Optimierung des Tecnai F20 Mikroskops für die Dunkelfeldholographie

Die Aufnahme der DF-Hologramme erfolgt an einem *FEI Tecnai F20 Cs-corr* TEM. Dieses TEM verfügt über einen Cs-Korrektor von *CEOS* und eine $1k \times 1k$ CCD-Kamera von *Gatan*. Da der Abbildungsstrahlengang des Mikroskops standardmäßig für die hochauflösende TEM und Holographie ausgerichtet ist, mussten einige Anpassungen durchgeführt werden, um den Holographiestrahlgang an die Anforderungen für die Dunkelfeldholographie anzupassen.

5.3.1 Anforderungen

Die Halbleiterindustrie formuliert ihre Anforderungen in der *International Technology Roadmap for Semiconductors* (ITRS 2008). Der Halbleiterkonzern *GLOBALFOUNDRIES* verlangt für eine Deformationsmessung eine Lateralauflösung $d_{res} \leq 5 \text{ nm}$ und eine Signalauflösung $\Delta\epsilon = 5 \cdot 10^{-4}$. Das holographische Gesichtsfeld muss so groß sein, dass es alle relevanten Bereiche des Deformationsfeldes abbildet. Üblicherweise bedeutet dies, das Substrat unterhalb von Source, Drain und Gate eines Transistors in der rekonstruierten Deformationskarte vollständig zu erfassen. Deshalb benötigt man bei Transistorstrukturen auf Bulk-Si mit Strukturbreiten kleiner als 45 nm wenigstens ein holographisches Gesichtsfeld von $w_{hol} = 200 \text{ nm}$. Eine besondere Herausforderung stellen Transistorstrukturen auf SOI (*Silicon-on-Insulator*) dar, bei denen der verspannte Si-Kristall durch eine isolierende SiO_2 -Schicht vom Si-Substrat getrennt ist. Dabei besitzen das SOI und die SiO_2 -Schicht jeweils eine Breite von ca. 100 nm. Um das SOI mit dem Si-Substrat überlagern zu können, benötigt man hier holographische Gesichtsfelder $w_{hol} \approx 600 \text{ nm}$ (Abschnitt 6.3).

5.3.2 Limitierungen durch experimentellen Aufbau

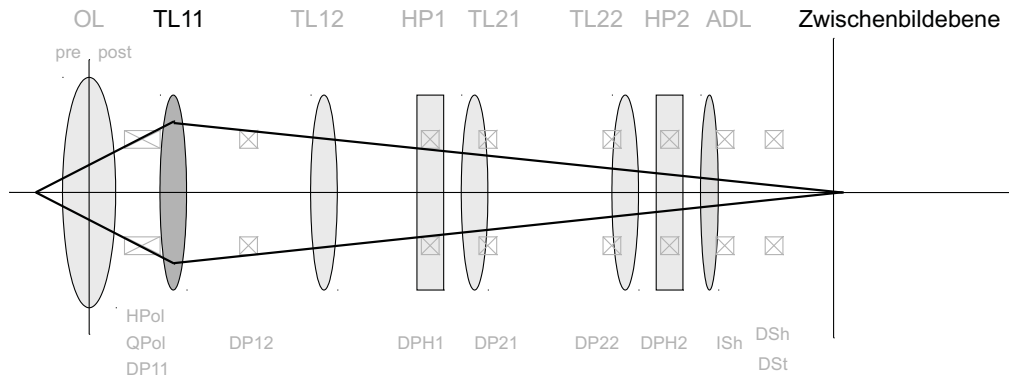
Die Lateralauflösung $1/q_{res}$ wird bereits durch die Abtastung der Hologrammstreifen auf der CCD-Kamera begrenzt:

$$q_{res} \leq \frac{q_c}{3} = \frac{1}{3s_{hol}} = \frac{M_{ges}}{12d_{CCD}}, \quad (5.23)$$

mit dem Streifenabstand s_{hol} , der Trägerfrequenz q_c der Streifen, der Pixelgröße d_{CCD} der CCD-Kamera und der Gesamtvergrößerung M_{ges} . Da die Pixelgröße d_{CCD} durch die CCD-Kamera vorgegeben ist, bleibt als einzig freier Parameter die Gesamtvergrößerung M_{ges} übrig, um den Streifenabstand zu verringern, also die Lateralauflösung zu verbessern. Gleichzeitig ist das Gesichtsfeld FOV der CCD-Kamera umgekehrt proportional zu M_{ges} :

$$FOV = \frac{w_{det}}{M_{ges}}, \quad (5.24)$$

(a) Unkorrigierte Pseudo-Lorentz Linse



(b) Cs-korrigierte Pseudo-Lorentz Linse

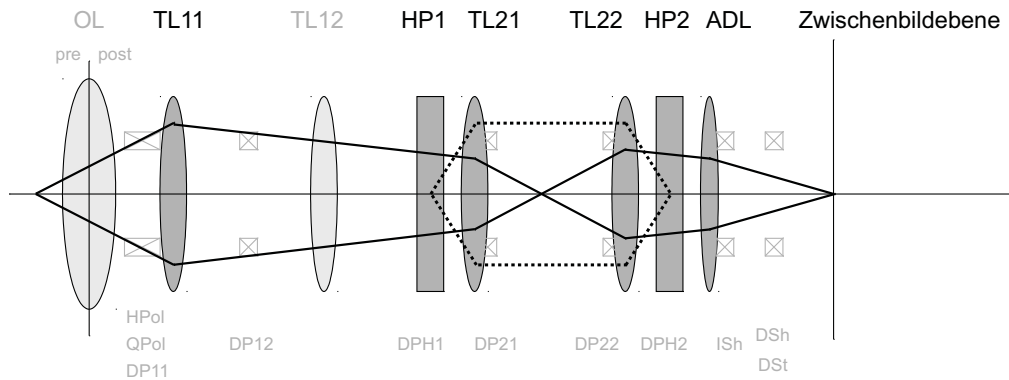


Abbildung 5.5: Cs-Korrektor als Pseudo-Lorentz Linse (pLL): a) Die erste Transferlinse bildet das Objekt in die Zwischenbildebene ab. Objektivlinse und übrige Korrekturalelemente sind ausgeschaltet (SNOECK *et al.* 2006). b) Unter Einbeziehung der Hexaploptik (HP1 und HP2) des Cs-Korrektors erfolgt die Korrektur der Abbildungsfehler der Transferlinse TL11 (LINCK *et al.* 2010).

Während mit zunehmender Vergrößerung die Lateralauflösung ebenfalls zunimmt, nimmt das FOV ab. Der Hologrammstreifenabstand

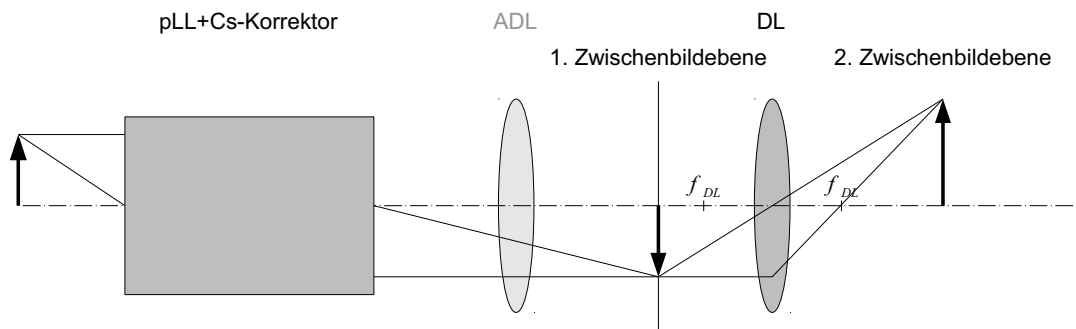
$$s_{hol} = \frac{\lambda f}{2\gamma_0 a} \frac{1}{U_F} \quad (5.25)$$

und die Breite des holographischen Gesichtsfeldes

$$w_{hol} = \frac{2\gamma_0 b f}{a + b} U_F - 2r_F \frac{f}{a} \quad (5.26)$$

sind über die Spannung U_F des Biprismafadens gekoppelt. Die übrigen Größen beschreiben die Geometrie des Aufbaus und können Abbildung 5.1 entnommen werden. Damit sind die Lateralauflösung (durch den Streifenabstand) und das holographische Gesichtsfeld proportional. Es bleibt die Herausforderung, die Lateralauflösung $1/q_{res}$, das holographische Gesichtsfeld w_{hol} und das Gesichtsfeld der CCD-Kamera FOV gleichzeitig aufeinander abzustimmen. Einen zusätzlichen Freiheitsgrad, um w_{hol} und FOV aufeinander abzustimmen, gewinnt man, indem man den Abstand b vom Biprisma zur Zwischenbildebene durch Änderung der Beugungslinsenanregung ändert (SICKMANN *et al.* 2011).

(a) AD-Linse ausgeschaltet – DIF-Linse stark erregt (pLL76)



(b) AD-Linse schwach erregt – DIF-Linse schwach erregt (pLL50)

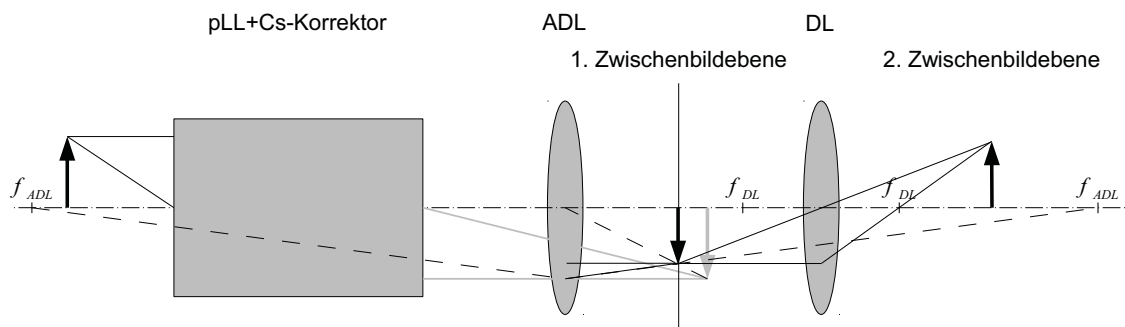


Abbildung 5.6: Änderung der Zwischenbildvergrößerung mit Adapterlinse (ADL) und Beugungslinse (DL) für die Cs-korrigierte pseudo Lorentz Linse (pLL) am *Tecnai F20* Mikroskop (SICKMANN *et al.* 2010).

5.3.3 Zusätzliche Freiheitsgrade mit Cs-Korrektor und Pseudo-Lorentz Linse

Der Cs-Korrektor im *FEI Tecnai F20 Cs-corr* TEM bietet weitere Freiheitsgrade, um den Holographiestrahlangang den Anforderungen anzupassen. Zunächst kann die erste Transferlinse des Cs-Korrektors bei ausgeschalteter Objektivlinse als Pseudo-Lorentz-Linse (pLL) benutzt werden (SNOECK *et al.* 2006) (Abbildung 5.5a). Hierbei bleiben die übrigen Korrektur Elemente des Cs-Korrektors ausgeschaltet. Darüber hinaus wurde von der Herstellerfirma CEOS ein Abbildungsstrahlengang entwickelt, bei dem die übrigen Elemente des Cs-Korrektors zur Korrektur der Bildfehler der pLL benutzt werden können (LINCK *et al.* 2010) (Abbildung 5.5b). Durch eine gleichzeitige aufeinander abgestimmte Änderung der Anregung von Adapterlinse (ADL) und Beugungslinse (BL), kann der Abstand b vom Biprisma zur Zwischenbildebene auch bei Benutzung der korrigierten pLL so angepasst werden, dass die Hologrammbreite w_{hol} möglichst mit dem Gesichtsfeld FOV der CCD-Kamera in Übereinstimmung gebracht werden kann. Abbildung 5.6 skizziert zwei optimierte Strahlengänge für die bildfehlerkorrigierte pLL (SICKMANN *et al.* 2010):

- Abbildung 5.6a: Die ADL wird ausgeschaltet und die BL auf 76 % ihres Maximalwertes erregt (Modus pLL76). Aufgrund der relativ großen Zwischenbildvergrößerung beträgt die maximal erzielbare Lateralauflösung $d_{res} \approx 3 \text{ nm}$ bei einem holographischen Gesichtsfeld $w_{hol} \approx 340 \text{ nm}$.
- Abbildung 5.6b: Die ADL wird mit einem Strom $I_{ADL} = 0,36 \text{ A}$ nur schwach erregt und wirkt wie eine verkleinernde Lupe. Die BL wird auf 50 % ihres Maximalwertes angeregt (Modus pLL50). Die Zwischenbildvergrößerung nimmt ab, so dass für die maximal

erzielbare Lateralauflösung $d_{res} \approx 8 \text{ nm}$ erreicht werden bei einem holographischen Gesichtsfeld $w_{hol} \approx 900 \text{ nm}$.

Ein dem Modus pLL76 äquivalenter Strahlengang kann auch bei Verwendung der Objektivlinse mit angeschalteten Cs-Korrektor realisiert werden. Dazu muss die Anregung der ADL erhöht werden (Strom $I_{ADL} = 1,81 \text{ A}$) und gleichzeitig die Anregung der BL auf 43 % ihres Maximalwertes reduziert werden (Modus HR43). Auf diese Weise wird die ursprünglich für die Hochauflösung optimierte Zwischenbildvergrößerung in den Bereich der mittleren Auflösung reduziert. So erreicht man eine maximale Lateralauflösung von $d_{res} \approx 2 \text{ nm}$ bei einem holographische Gesichtsfeld $w_{hol} \approx 200 \text{ nm}$ (LINCK *et al.* 2010; SICKMANN *et al.* 2010).

Abbildung 5.7 illustriert die Messung der [110]-Gitterdeformation an der gleichen Transistorstruktur mit den Holographiemodi pLL50 und HR43. Im Modus pLL50 lassen sich aufgrund des holographischen Gesichtsfeldes $w_{hol} = 700 \text{ nm}$ die Deformationsfelder an bis zu sieben identischen, nebeneinander liegenden Transistoren der 45 nm-Strukturbreite mit einem einzigen Hologramm aufzeichnen. Die Lateralauflösung, die durch den Radius der Filtermaske zur Separation des Seitenbandes bestimmt wird, beträgt $d_{res} = 8,9 \text{ nm}$. Im Modus HR43 kann mit dem holographischen Gesichtsfeld $w_{hol} = 190 \text{ nm}$ nur ein einzelner Transistor in einem Hologramm aufgezeichnet werden. Die Lateralauflösung $d_{res} = 3,2 \text{ nm}$ ist jedoch fast dreimal größer als im Modus pLL50. Dadurch kann die Deformationsverteilung im Gatekanal und an den Grenzflächen zwischen Si und SiGe genauer untersucht werden. Wie ein Vergleich der Linienprofile in den Deformationskarten im HR43 und pLL50 Modus am selben Transistor zeigt, sind die Ergebnisse der Deformationsmessung identisch: Unterhalb des Gates erreicht die [110]-Gitterdeformation ihren Maximalwert $\varepsilon_{110} = 0.01 = 1 \%$.

5.3.4 Verbleibende Limitierungen

Die in Abschnitt 5.3 vorgestellten Abbildungsstrahlengänge können ohne Einschränkungen nur in der Hellfeldholographie benutzt werden. In der Dunkelfeldholographie existieren zwei spezifische Einschränkungen: begrenzte Beleuchtungsskippping und defokussierte Blende in der hinteren Brennebene.

5.3.4.1 Begrenzte Beleuchtungsskippping

Um die Intensität in der abgebeugten Welle zu erhöhen, wird zur Aufnahme von DF-Hologrammen eine on-axis Dunkelfeldbeleuchtung eingestellt. Dabei wird der einfallende Strahl um den doppelten Bragg-Winkel gekippt, so dass der abgebeugte Strahl auf der optischen Achse verläuft. Am *Tecnai F20* TEM bei 200 kV Beschleunigungsspannung beträgt die notwendige Beleuchtungsskippping zur Aufnahme eines (220)-DF-Hologramms $\vartheta_{220} = 13 \text{ mrad}$ und zur Aufnahme eines (004)-DF-Hologramms $\vartheta_{004} = 18 \text{ mrad}$. Wird das *Tecnai F20* mit der gewöhnlichen Objektivlinse betrieben, z.B. im Modus HR43, kann die Beleuchtung ohne Einschränkung um die benötigten Winkel verkippt werden. Bei Benutzung der pLL, z.B. in den Modi pLL50 und pLL76, beobachtet man jedoch, wie ab einer Beleuchtungsskippping $\vartheta_{max} \gtrsim 15 \text{ mrad}$ eine Abschattung in das Beugungsbild wandert. Da sich das Objekt in beiden Betriebsmodi jeweils in der gleichen Ebene zwischen den Polschuhen der Objektivlinse befindet, würde man zunächst keine Einschränkung bei der Beleuchtungsskippping erwarten. Um jedoch die pLL am *Tecani F20* TEM nutzen zu können, muss die Objektivlinse zusammen mit dem Objektivlinsenvorfeld ausgeschaltet werden. Dadurch wird bei angeschalteter pLL der einfallende Elektronenstrahl im Bereich der oberen Polschuhe der Objektivlinse (oberhalb des Objekts) anders geführt als bei

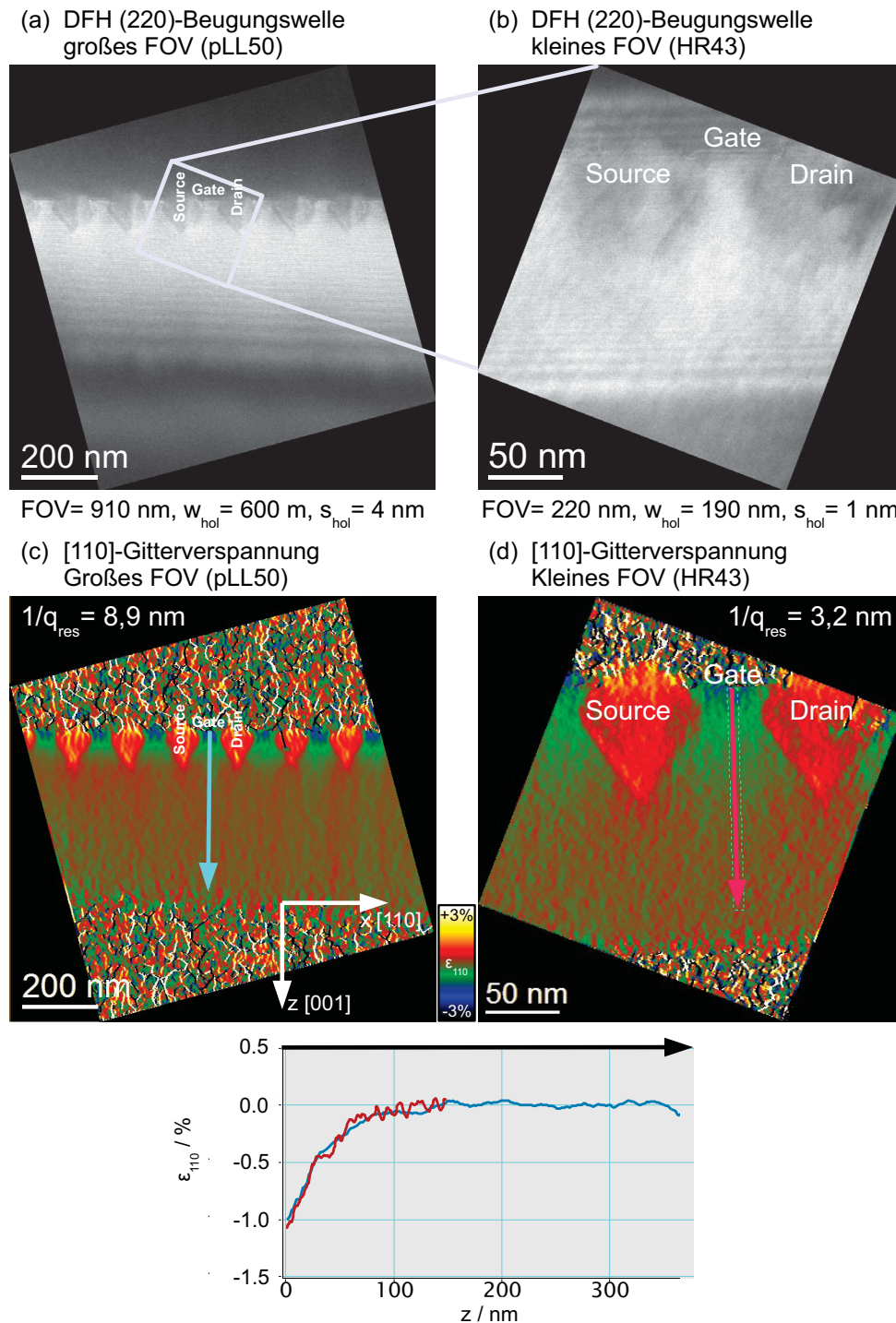


Abbildung 5.7: Deformationsmessungen bei unterschiedlichen Gesichtsfeldern und Lateralaufösungen am selben Transistor: a) Modus pLL50 mit holographischem Gesichtsfeld $w_{hol} = 700$ nm. b) Modus HR43 mit holographischem Gesichtsfeld $w_{hol} = 200$ nm. Rekonstruierte Karte der [110]-Gitterdeformation mit Lateralauflösung c) $d_{res} = 8,9$ nm und d) $d_{res} = 3,2$ nm. Linienprofile in c) und d) zeigen einen identischen Verlauf der [110]-Gitterdeformation vom Kanalbereich ins Si-Substrat; Maximum der [110]-Gitterdeformation in c) $\epsilon_{110} = -(1,00 \pm 0,07) \%$ und in d) $\epsilon_{110} = -(1,1 \pm 0,1) \%$.

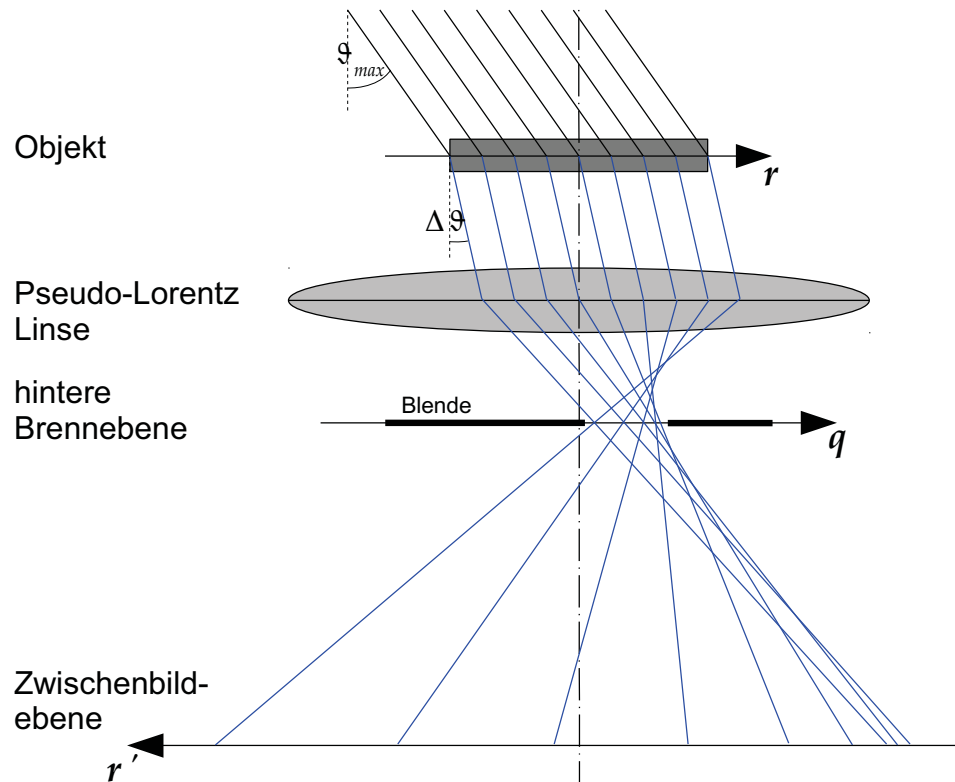


Abbildung 5.8: Eingeschränkte Beleuchtungskippung $\vartheta_{max} \approx 15 \text{ mrad}$ bei der pLL. Beim Einstellen der (004)-Dunkelfeldbeleuchtung ($\vartheta_{004} = 18 \text{ mrad}$) durchläuft das Bündel des abgebeugten (004)-Strahls die pLL mit einer Restkipplung $\Delta\vartheta \approx 3 \text{ mrad}$ zur optischen Achse. Dadurch wird in der Dunkelfeldabbildung Koma induziert (vgl. auch Abbildung 5.9).

angeschalteter Objektivlinse. Somit können die relativ großen Beleuchtungskippungen bei Dunkelfeldbeleuchtung nicht mehr durch das Objektivlinsenvorfeld kompensiert werden, was dazu führt, dass ab dem beobachteten Kippwinkel, der obere Polschuh der Objektivlinse den gekippten Strahl der Beleuchtung blockt (HOUELLIER 2011). Diese Limitierung ist charakteristisch für alle bisher bekannten Strahlengänge mit der pLL am *Tecnai F20* TEM und wurde auch an dem einzigen baugleichen TEM, dem *SACTEM* in Toulouse, beobachtet (CLAVERIE 2013).

Aufgrund der begrenzten Beleuchtungskippung können (004)-DF-Hologramme nicht unter Idealbedingungen aufgezeichnet werden. Beim Justieren der (004)-DF-Beleuchtung wird der beleuchtende Strahl bis zum Maximalwinkel $\vartheta_{max} \approx 15 \text{ mrad}$ verkippt, so dass der abgebeugte (004)-Strahl eine Restkipplung $\Delta\vartheta \approx 3 \text{ mrad}$ gegenüber der optischen Achse aufweist (Abbildung 5.8). Deshalb beobachtet man in der hinteren Brennebene den (004)-Reflex in einem Abstand von ca. $0,04 \text{ nm}^{-1}$ zur optischen Achse; die Blende zum Ausschneiden des Reflexes muss entsprechend verschoben werden, so dass eine off-axis DF-Beleuchtung vorliegt. Da der abgebeugte (004)-Strahl die pLL schräg zur optischen Achse durchläuft, wird bei der Dunkelfeldabbildung des (004)-Strahls zwangsläufig axiale Koma induziert ¹.

¹ Koma entsteht bei schräg zur optischen Achse einfallendem Strahlenbündel durch eine Überlagerung zweier Abbildungsfehler: der auch bei achsenparallelem Bündel wirkenden sphärischen Aberration und dem Astigmatismus schiefer Bündel. In der Bildebene entsteht anstelle eines scharfen Beugungsscheibchens ein Bildpunkt mit zum Rand der Optik gerichteten Schweif.

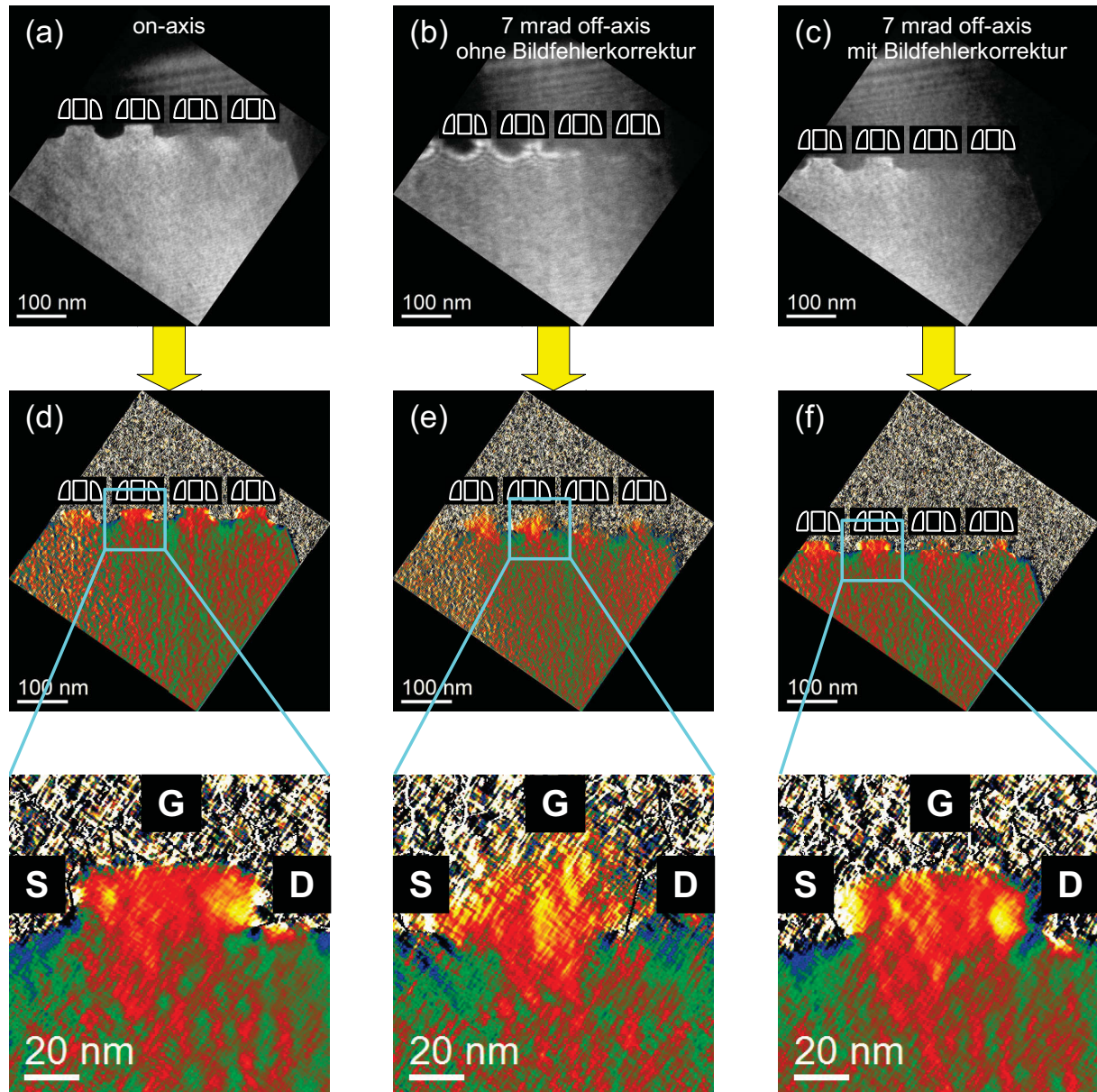


Abbildung 5.9: Einfluss von Koma bei schräg zur optischen Achse einfallender (220)-Dunkelfeldbeleuchtung bei pLL. a) Idealfall on-axis DF-Beleuchtung: Keine Einflüsse von Abbildungsfehlern. b) DF-Beleuchtung 7 mrad off-axis zur opt. Achse ohne Anpassung der Bildfehlerkorrektur: Starke Koma, Astigmatismus und leichter Defokus. Scharfe Kanten zwischen Kanalbereich und Deckschichten (Source, Gate, Drain) verwaschen. c) DF-Beleuchtung 7 mrad off-axis zur opt. Achse mit Anpassung der Bildfehlerkorrektur: Koma und Astigmatismus minimiert. Kanten zwischen Kanalbereich und Deckschichten erscheinen wieder scharf.

Abbildung 5.9 illustriert, welche Effekte eine nicht achsenparallele (off-axis) DF-Beleuchtung bei Aufnahme und Rekonstruktion eines (220)-DF-Hologramms hervorruft. Die (220)-DF-Bedingung wurde bewusst gewählt, da sie erlaubt, (220)-DF-Hologramme sowohl unter on-axis DF-Beleuchtung als auch unter einer künstlich eingestellten off-axis DF-Beleuchtung aufzuzeichnen. Abbildung 5.9a zeigt ein DF-Hologramm, das unter on-axis DF-Beleuchtung bei $\vartheta_{220} = 13 \text{ mrad}$ Beleuchtungskippung aufgezeichnet wurde und frei von Aberrationen ist. Dagegen zeigt Abbildung 5.9b ein DF-Hologramm, das an der gleichen Objektstelle mit nur der halben Beleuchtungskippung $\vartheta = 7 \text{ mrad}$ aufgezeichnet wurde; d.h. der abgebeugte (220)-Strahl durchläuft die pLL mit einer Kippung $\Delta\vartheta = 7 \text{ mrad}$ zur optischen Achse. Die dabei auftretenden Aberrationen führen zu starken Defokussäumen an den Objektkanten und zu einer Verformung der Objektstrukturen, hier der Source-/Drain-Kontakte. Wird das Hologramm mit diesen starken Abbildungsfehlern rekonstruiert, werden in der Deformationskarte Objektkanten bei Source, Gate und Drain verwaschen (Abbildung 5.9e). Man verliert im Vergleich zu Aufnahme unter on-axis Dunkelfeldbeleuchtung (Abbildung 5.9d) erkennbar an Auflösung. Mit Hilfe des Cs-Korrektors lassen sich die Abbildungsfehler bei schräger Dunkelfeldabbildung manuell vor der Aufnahme korrigieren. Als Kriterium zur Korrektur von Koma und zweizähligem Astigmatismus dient die Schärfe der Objektkanten im DF-Hologramm. Die Anregungen bestimmter Korrektur Elemente (Dipol und Quadrupol) werden so lange variiert, bis die Objektkanten scharf abgebildet werden (Abbildung 5.9c). Somit werden die Objektkanten auch in der Deformationkarte wieder scharf rekonstruiert (Abbildung 5.9f). Allerdings setzt die manuelle Bildfehlerkorrektur bei DF-Beleuchtung eine gewisse Übung des Benutzers sowie ein grundlegendes Verständnis über die Funktionsweise des Cs-Korrektors voraus.

5.3.4.2 Defokussierte Blende in der hinteren Brennebene

Um den abgebeugten Strahl aus dem Beugungsbild zu isolieren, wird die Objektivblende verwendet. Die Ebene der Objektivblende ist an die Brennweite der Objektivlinse angepasst. Da die pLL im allgemeinen eine größere Brennweite als die Objektivlinse besitzt, befindet sich die Blende nun vor der hinteren Brennebene der pLL und wird defokussiert im Beugungsbild abgebildet (Abbildung 5.10). Dies kann u.U. dazu führen, dass die kleinste verfügbare Blende, die sehr nützlich wäre, um den Kontrast der Dunkelfeldabbildung zu erhöhen, nicht mehr benutzt werden kann (CLAVERIE 2013). Die kleinste im *Tecnai F20* TEM verfügbare Blende besitzt einen Blendenradius $r_{bl} = 20 \mu\text{m}$. Allerdings konnte kein Einfluss der defokussierten Abbildung der Blende auf die Dunkelfeldabbildung beobachtet werden.

Um den Radius der Blende in der hinteren Brennebene in Raumfrequenzen zu bestimmen, wurde der beleuchtende Strahl so weit gekippt, bis im Beugungsbild eines Si-Kristalls der Nullstrahl den Rand der Blende erreicht. Aus dem Kippwinkel $\vartheta_{bl} = 2,3 \text{ mrad}$ kann mit $q_{bl} = k\vartheta_{bl}$ der Blendenradius $q_{bl} \approx 0,9 \text{ nm}^{-1}$ berechnet werden. Er ist deutlich kleiner als der Abstand des abgebeugten Reflexes zum Nullstrahl für die benutzten Zweistrahlbedingungen: $d_{111} = 3,2 \text{ nm}^{-1}$, $d_{220} = 5,2 \text{ nm}^{-1}$, $d_{004} = 7,4 \text{ nm}^{-1}$. Also kann der abgebeugte Strahl problemlos mit der vorhandenen Blende aus dem Beugungsbild isoliert werden. Der Blendenradius definiert gleichzeitig eine Auflösungsgrenze für die Dunkelfeldabbildung, da er den Öffnungswinkel der pLL künstlich begrenzt. Allerdings ist wegen $\delta_{bl} = 1/0,9 \text{ nm} = 1,1 \text{ nm}$ die durch den Blendenradius gegebene Auflösung bereits größer als die beste erzielbare holographische Lateralauflösung $1/q_{res} \approx 3 \text{ nm}$ (Modus pLL76, Abschnitt 5.3.3). Somit stellt die Blende in der Dunkelfeldholographie keine Begrenzung für die Lateralauflösung dar.

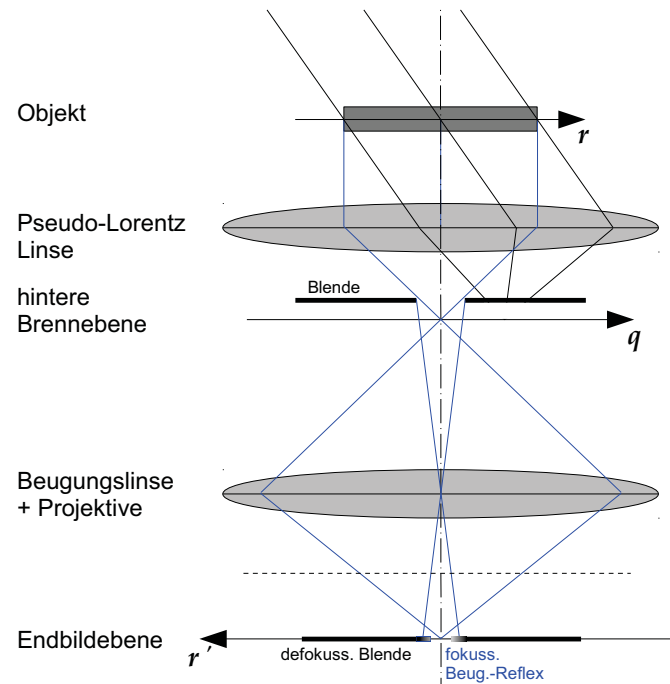


Abbildung 5.10: Defokussierte Abbildung der Blende im Beugungsmodus der Pseudo-Lorentz Linse (pLL). Die Beugungslinse fokussiert das Beugungsbild der pLL in die Endbildebene. Der abgebeugte Strahl wird mit der Objektivblende ausgeschnitten. Da die Lage der Blendenebene auf die kleinere Brennweite der Objektivlinse angepasst ist, wird die Blende im Beugungsbild defokussiert abgebildet. Der Beugungsreflex ist hingegen fokussiert.

5.4 Aufbereitung und Rekonstruktion von Dunkelfeldhologrammen

Die Rekonstruktion des DF-Hologramms erfolgt mit den Methoden der digitalen Bildverarbeitung unter Anwendung der Fourieranalyse. Dabei lässt sich die Qualität der Rekonstruktion erheblich verbessern, wenn die DF-Hologramme vor der Rekonstruktion aufbereitet werden. Für diesen Zweck kann im *Speziellabor Triebenberg* auf zwei Skripten für die Bildverarbeitungssoftware *DigitalMicrograph* zurückgegriffen werden, die ursprünglich zur Optimierung der Rekonstruktion von Hellfeldhologrammen entwickelt wurden (WOLF 2010). Dazu gehört die Beseitigung „falscher“ Pixelwerte (Abschnitt 5.4.1), die durch fehlerhafte Pixel oder CCD-Kamera oder durch Röntgeneinschläge in den Szintillator der CCD-Kamera verursacht werden, sowie das Entfernen der Fresnelschen Beugungssäume (Abschnitt 5.4.2), die durch Beugung an dem defokussierten Biprismafaden entstehen. Diese Artefakte sind in der DFH besonders kritisch, da sie bei der Ableitung der Deformationskarte aus der rekonstruierten Phase der Beugungswelle zu zusätzlichen Gradienten führen, welche das ursprüngliche Deformationssignal überlagern und verfälschen. Für die eigentliche Rekonstruktion hat sich in der DFH bewährt, zur Trennung des Seiten- vom Zentralband ein sinc-Filter anstatt des herkömmlichen Butterworth-Filters zu verwenden; die Gründe hierfür werden in Abschnitt 5.4.3 erläutert. Des weiteren wird untersucht, ob durch Wienerfilterung der DF-Hologrammintensität eine Rauschreduzierung in der rekonstruierten Phase erzielt werden kann und dies zu einem besseren Signal-Rausch-Verhältnis nach Ableitung der Deformationskarte beiträgt.

5.4.1 Beseitigen fehlerhafter Pixel

Jede CCD-Kamera besitzt eine geringe Anzahl an fehlerhaften Pixeln, die „falsche“ Pixelwerte im DF-Hologramm liefern. Dabei handelt es sich um Pixel, die nicht mehr funktionieren (*dead pixel*) oder ein stochastisches, nicht lineares Ansprechverhalten besitzen (*hot pixel*). Des weiteren kann es während der Aufnahme vorkommen, dass die Atome in der Probe durch die hochenergetischen Elektronen angeregt werden, aber gleich wieder relaxieren. Es kommt zur Aussendung von Röntgenquanten, die den Szintillator ungebremst passieren und direkt auf die CCD-Kamera treffen. Mit Hilfe eines von WOLF (2010) entwickelten *DigitalMicrograph*-Skripts ist es möglich, fehlerhafte Pixel schnell und einfach zu identifizieren und zu korrigieren. Dazu werden der Mittelwert und die Standardabweichung des gesamten Bildes berechnet. Anschließend wird anhand des Peak-Kriteriums überprüft, um wie viel ein Pixelwert vom Mittelwert des Bildes abweicht, wobei die Abweichung in Vielfachen der Standardabweichung des Bildes angegeben wird. Das Differenzkriterium gibt die Differenz eines Pixelwertes zu den Werten seiner horizontalen und vertikalen Nachbarpixel ebenfalls als Vielfache der Standardabweichung des Bildes an. Erfüllt ein Pixel eines der Kriterien nicht, wird sein Wert auf den Mittelwert seiner acht umgebenden Nachbarpixel gesetzt.

Abbildung 5.11 illustriert, wie die Korrektur fehlerhafter Pixel zu einer Verbesserung in der Signalqualität der rekonstruierten Deformationsverteilung beiträgt. Als Beispiel dient hier ein (004)-DF-Hologramm eines mit SiGe an Source und Drain in [001]-Gitterrichtung tensil verspannten Transistors. Abbildung 5.11a zeigt das ursprünglich aufgezeichnete Hologramm ohne Korrektur fehlerhafter Pixel. In dem Linienprofil der Intensitätsverteilung des Hologramms lassen sich die fehlerhaften Pixel als einzelne Peaks von ungewöhnlich hoher Intensität identifizieren. Nach der Korrektur der fehlerhaften Pixel erhält man das Hologramm in Abbildung 5.11b. Im Linienprofil der Intensitätsverteilung wurden die Ausreißer durch die Werte der Nachbarpixel approximiert. Bei der Rekonstruktion der Phase aus dem Hologramm werden die fehlerhaften Pixel der CCD-Kamera in fehlerhafte rekonstruierte Pixel überführt. Der vergrößerte Ausschnitt der Phasenverteilung in Abbildung 5.11c zeigt solch ein rekonstruiertes fehlerhaftes Pixel, dessen Phasenwert deutlich von dem eigentlichen Phasenverlauf abweicht. Dagegen erhält man nach Korrektur der fehlerhaften Pixel einen stetigen Phasenverlauf in Abbildung 5.11d. Da die Deformationsverteilung aus der Ableitung der Phase gewonnen wird, führt jedes rekonstruierte fehlerhafte Pixel zu einer Verstärkung des Rauschens in der rekonstruierten Deformationsverteilung. Wie Abbildung 5.11d veranschaulicht, stellen die Kanten an den rekonstruierten fehlerhaften Pixeln sehr starke Gradienten dar, welche zu entsprechend großen, jedoch fehlerhaften Deformationswerten in dem rekonstruierten Pixel führen. So weist der Verlauf der [001]-Deformation in Abbildung 5.11d an den Kanten des rekonstruierten Pixels Werte von $\varepsilon = \pm 3\%$ auf, welche deutlich von dem ursprünglich konstanten Untergrund mit $\varepsilon = \pm 0,5\%$ abweichen. Dagegen zeigt Abbildung 5.11f, wie sich diese Artefakte mittels Korrektur der fehlerhaften Pixel erfolgreich vermeiden lassen.

5.4.2 Entfernen der Fresnelschen Beugungssäume

Da das Biprisma in der off-axis Elektronenholographie oberhalb der Bildebene positioniert werden muss, um Objekt- und Referenzwelle überlagern zu können, wird es selbst defokussiert abgebildet. Aufgrund von Fresnelbeugung der beiden Teilwellen an den Kanten des Biprismafadens treten in der rekonstruierten Welle Artefakte auf: Rechter und linker Rand des Hologramms parallel zum Biprismafaden sind durch zusätzliche Amplituden- und

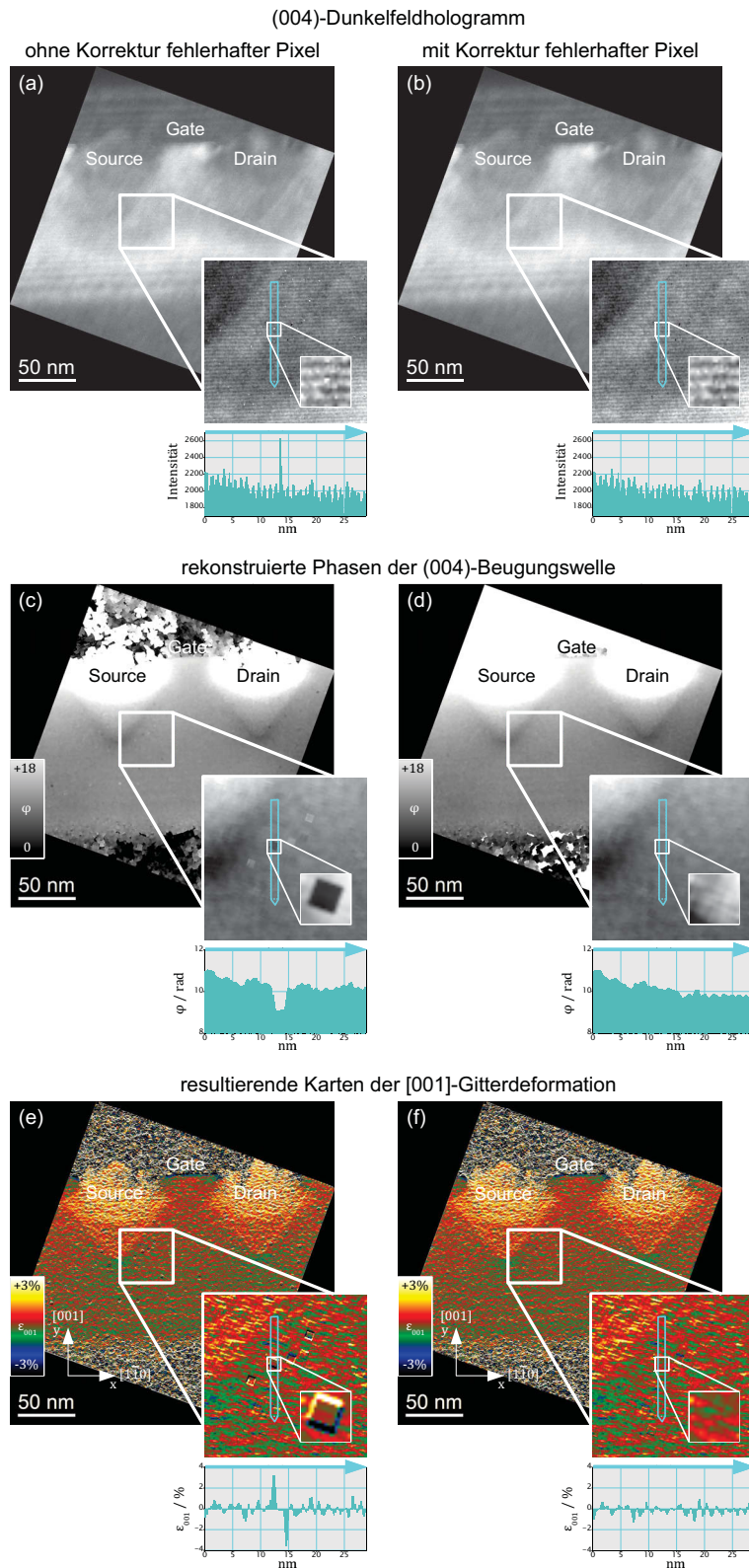


Abbildung 5.11: Einfluss fehlerhafter Pixel: a) (004)-DF-Hologramm mit fehlerhaften Pixeln als einzelne Peaks von ungewöhnlich hoher Intensität im Intensitätsprofil. b) Korrektur fehlerhafter Pixel: Fehlerhafte Pixelwerte wurden durch die Werte der Nachbarpixel approximiert. c) [004]-Gitterdeformation abgeleitet aus a): Starke Abweichungen von der ursprünglichen Deformationsverteilung an fehlerhaften Pixeln. d) [004]-Gitterdeformation abgeleitet aus a): Deformationskarte mit deutlich verringertem Rauschen.

Phasenmodulationen verfälscht. Für eine Leerwelle erhält man die Hologrammintensität

$$I_{hol}(x) = I_1(x) + I_2(x - u) + 2\sqrt{I_1(x) + I_2(x - u)} \cos [2\pi q_c + \delta\varphi(x)], \quad (5.27)$$

mit $I_1(x)$ und $I_2(x - u)$, den durch die Fresnelbeugung modulierten Intensitäten von Objekt- und Referenzwelle, sowie $\delta\varphi(x) = \varphi_1(x) - \varphi_2(x - u)$, der Differenz der entsprechenden „Fresnel-Phasen“ (LICHT 1996). Aus diesem Hologramm rekonstruiert man im Gegensatz zur ebenen Beugungswelle $\psi_g(x)$ die durch Fresnelsche Beugung in Amplitude und Phase modulierte Beugungswelle

$$\tilde{\psi}_g(x) = \psi_g(x) \sqrt{I_1(x) + I_2(x - u)} \exp [i\delta\varphi(x)]. \quad (5.28)$$

Somit besitzt in der DFH die rekonstruierte Beugungswelle die Phase $\tilde{\varphi}_g(x) = \varphi_g(x) + \delta\varphi(x)$, in welcher die geometrische Phase φ_g von der Phase $\delta\varphi(x)$ überlagert wird. Bei Ableitung der Deformationskarte tritt neben dem Anteil der tatsächlichen Gitterdeformation $\varepsilon_{xx}(x)$ ein durch die Fresnelmodulation erzeugter, künstlicher Anteil $\delta\varepsilon_{xx}(x)$ hinzu:

$$\tilde{\varepsilon}_{xx}(x) = \frac{\partial \tilde{\varphi}_g(x)}{\partial x} = \frac{\partial \varphi_g(x)}{\partial x} + \frac{\partial \delta\varphi(x)}{\partial x} = \varepsilon_{xx}(x) + \delta\varepsilon_{xx}(x). \quad (5.29)$$

Hierbei wurde davon ausgegangen, dass die Fresnelmodulationen $\delta\varphi(x)$ in der selben Richtung vorliegen wie die Gitterdeformation. Dies entspricht ziemlich genau der Situation bei (004)- bzw. (004)-DF-Hologrammen: Weil der Biprismafaden zur Aufnahme der Hologramme möglichst senkrecht zur [001]-Richtung und damit parallel zu den Transistorstrukturen in [110]-Richtung ausgerichtet wird, verlaufen die Fresnelmodulationen parallel zur [001]-Richtung. In Abbildung 5.12a lassen sich diese Fresnelmodulationen an den Rändern eines (004)-DF-Hologramms beobachten, das einen mit SiGe an Source/Drain-Kontakten verspannten Transistor zeigt. Im Spektrum treten die Fresnelmodulationen als zusätzliches Frequenzspektrum zwischen Zentral- und Seitenband in Erscheinung (Abbildung 5.12b). Es lässt sich mit Hilfe eines Fresnefilters (WOLF 2010) entfernen (Abbildung 5.12c), so dass nach inverser Fouriertransformation eine fresnelgefilterte Hologrammintensität vorliegt (Abbildung 5.12d). Aus dem ungefilterten DF-Hologramm rekonstruiert man die Phase in Abbildung 5.13a, in der sich die Fresnelmodulationen im Si-Substrat am Rand des holographischen Gesichtsfelds beobachten lassen. Durch Fresnefilterung lassen sich diese Modulationen weitgehend eliminieren (Abbildung 5.13b). Nach Ableitung der Deformationskarte verursachen diese Modulationen die in Abbildung 5.13a gezeigten Artefakte: Im Referenzkristall mit dem tatsächlich konstanten Deformationsfeld $\varepsilon_{yy} = 0\%$ beobachtet man, wie der Deformationswert stattdessen um $\varepsilon_{yy} = \pm 0.2\%$ oszilliert. Mit Fresnefilterung tritt dieser Artefakt nicht mehr auf; der Deformationswert im Si-Substrat bleibt unmoduliert (Abbildung 5.13b). Die Fresnelmodulationen reichen in Abbildung 5.13a (Abbildungsmodus pLL76, Abschnitt 5.3.3) vom Rand bis zu 60 nm tief in das holographische Gesichtsfeld. Erst dort sind sie so stark abgeklungen, dass sie keine Artefakte in der Deformationskarte erzeugen. Daher ist es sinnvoll, das Objekt so zu positionieren, dass sich die interessierenden Objektdetails und Deformationsfelder in der Mitte des holographischen Gesichtsfeldes befinden. So verbleibt bei großen holographischen Gesichtsfeldern (Abbildungsmodus pLL50, Abschnitt 5.3.3) in der Mitte des DF-Hologramms ein mindestens 500 nm breiter Bereich frei von Fresnelmodulationen, der ausreicht, um die interessierenden Strukturen artefaktfrei abzubilden. Daher kann in diesen besonderen Fällen auch auf eine Fresnefilterung verzichtet werden.

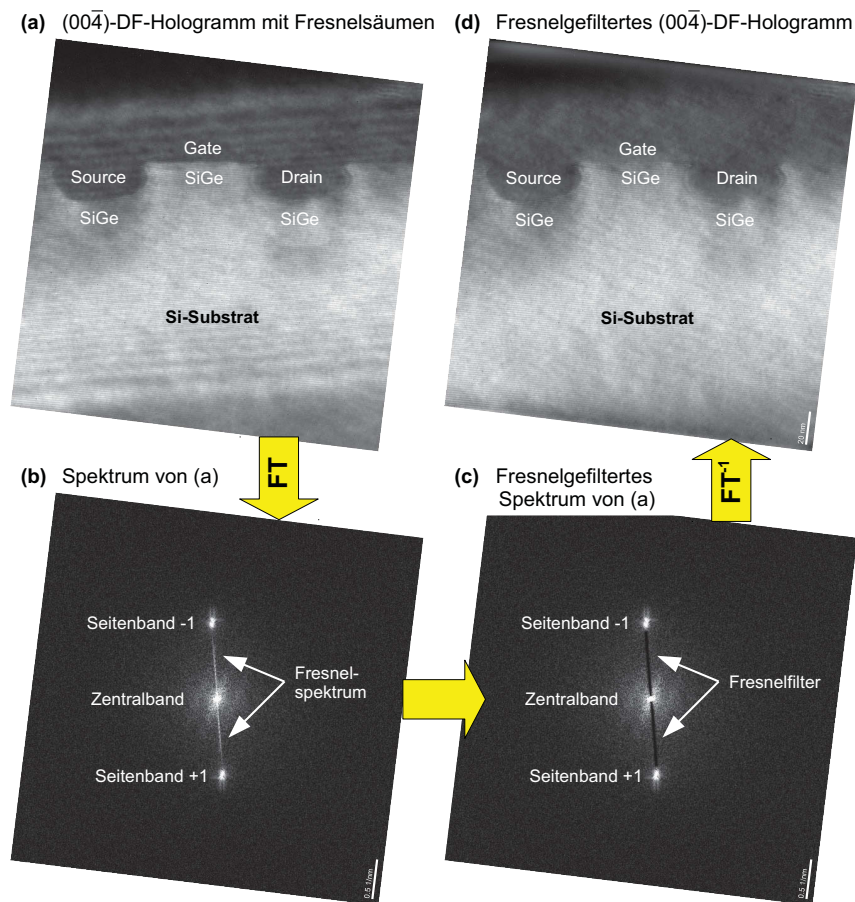


Abbildung 5.12: a) DF-Hologramm der $(00\bar{4})$ -Beugungswelle moduliert durch Fresnelbeugung am Biprisma. b) Spektrum des DF-Hologramms mit Fresnelspektrum der Fresnelschen Beugungssäule. c) Filterung des Fresnelspektrums. d) Gefiltertes DF-Hologramm ohne Fresnelmodulationen.

Während die Fresnelmodulationen bei der Ableitung der $[001]$ -Gitterdeformation aus dem $(00\bar{4})$ -DF-Hologramm zu Artefakten führen, stören sie die Auswertung der $[110]$ -Deformation aus einem (220) -DF-Hologramm nicht. Weil dabei nur die Gradienten entlang der $[110]$ -Richtung abgeleitet werden, liefern die parallel zur $[001]$ -Richtung verlaufenden Fresnelmodulationen keinen Beitrag. Abbildung 5.15a zeigt ein (220) -DF-Hologramm mit, Abbildung 5.15b das selbe Hologramm ohne Fresnelmodulationen. Es wurde an der gleichen Transistorstruktur aufgezeichnet, wie zuvor das $(00\bar{4})$ -DF-Hologramm in Abbildung 5.12. Die rekonstruierten Deformationskarten in Abbildung 5.15c und 5.15d weisen, unabhängig davon ob das Freselspektrum herausgefiltert wurde oder nicht, keine signifikanten Unterschiede auf. Sobald das Biprisma nicht mehr parallel zu der $[110]$ -Richtung ausgerichtet ist, sondern einen größeren Winkel mit dieser Richtung einschließt, beeinflussen die Fresnelmodulationen die Deformationskarten bezüglich $[001]$ - und $[110]$ -Gittergeformation gleichermaßen. Sie lassen sich dann in der rekonstruierten Phase sowohl der $(00\bar{4})$ -Beugungswelle in y -Richtung als auch der (220) -Beugungswelle in x -Richtung beobachten.

Trotz der Vorteile für die DFH stößt die Fresnelfilterung an ihre Grenzen, wenn sich Fresnelspektrum und Seitenbandinformation im Fourierraum überlagern, oder die Fresnelstreifen durch die Verteilung des Objektes im Ortsraum zu stark moduliert werden.

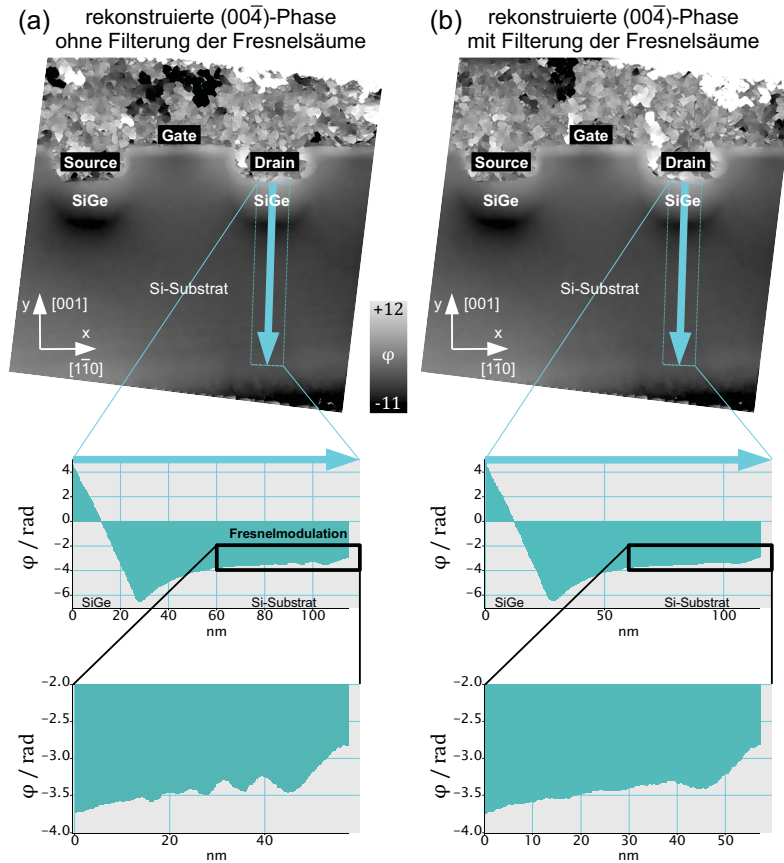


Abbildung 5.13: Rekonstruierte Phase der $(00\bar{4})$ -Beugungswelle. a) ohne Fresnel-Filterung: typische Modulation durch die Fresnelsäume an den Rändern des holographischen Gesichtsfeldes. b) Mit Fresnel-Filterung: Dämpfung der Fresnelsäume.

5.4.3 Wahl der Rekonstruktionsmaske

Um die komplexe Beugungswelle zu rekonstruieren, wird aus dem Spektrum des Hologramms das Seitenband +1 mit einer Filtermaske ausgeschnitten, anschließend zentriert und invers fouriertransformiert. Die Auflösung der rekonstruierten Beugungswelle wird im mittleren Auflösungsbereich durch den Radius der Filtermaske begrenzt, da er die Größe des rekonstruierten Pixels in der rekonstruierten Beugungswelle bestimmt. Üblicherweise verwendet man zur holographischen Rekonstruktion ein hartes Filter oder ein Butterworth-Filter. Das harte Filter lässt im Spektrum nur die Raumfrequenzen bis zu einer Maximalfrequenz q_{max} passieren, schneidet jedoch alle größeren Raumfrequenzen abrupt ab. Es eignet sich gut zur Rekonstruktion periodischer Strukturen (kristalliner Objekte) in der Hochauflösung ($d_{res} \approx 0.1 \text{ nm}$). In der mittleren Auflösung ($d_{res} = 5 \dots 10 \text{ nm}$) ist ein weiches Filter wie das Butterworth-Filter besser für die Rekonstruktion großflächiger Phasenstrukturen geeignet. Das Butterworth-Filter besitzt die Form (Russ 2007):

$$H_{bw}(q) = \frac{1}{1 + \left(\frac{|q|}{q_0}\right)^{2n}}, \quad (5.30)$$

mit der Ordnung n des Filters, die angibt, wie schnell das Filter um den Radius $|q| = q_0$ von 1 auf 0 abklingt; hierbei gibt q_0 die Halbwertsbreite des Filters an. Bei der Rekonstruktion wird die inverse Fouriertransformierte der numerischen Filterfunktion mit der Beugungswelle

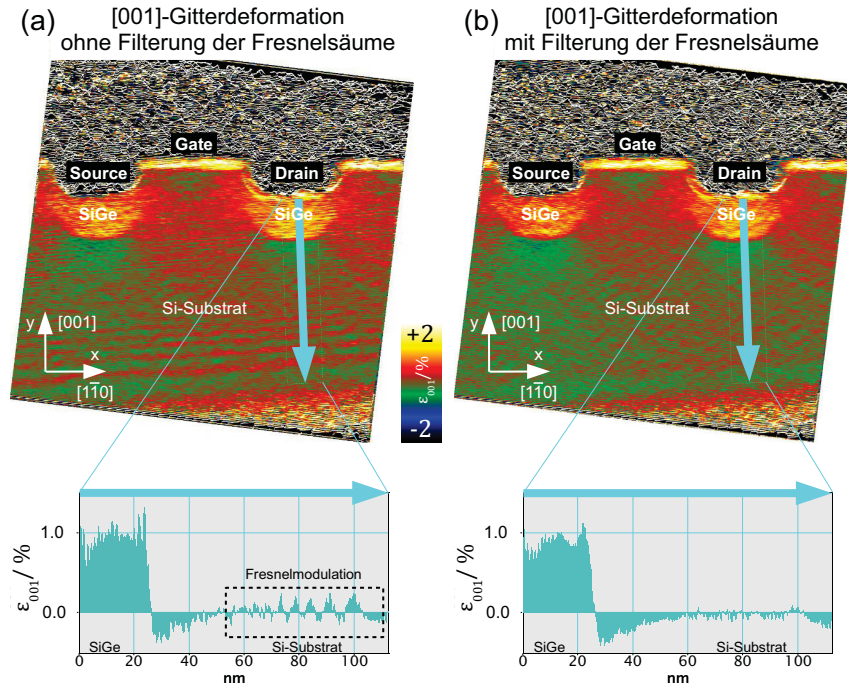


Abbildung 5.14: Deformationskarte der [001]-Gitterdeformation ε_{001} . a) ohne Fresneelfilterung: Überlagerung des Deformationssignals durch Fresnelmodulation. b) Fresneelfilterung vermeidet diesen Artefakt.

gefaltet. Dies führt beim Butterworth-Filter zu einer starken Korrelation auch weit entfernter Pixel und zu einer starken Delokalisierung (WOLF 2010). Diese Probleme lassen durch Verwendung eines sinc-Filters zur Rekonstruktion vermeiden. Der sinc-Filter besitzt die Form:

$$H_{\text{sinc}}(q) = \frac{\sin(\pi x_{\text{res}} q)}{\pi x_{\text{res}} q} \equiv \text{sinc}(\pi x_{\text{res}} q). \quad (5.31)$$

Dies stellt sicher, dass jedes rekonstruierte Pixel der rekonstruierten Welle mit der Rechteckfunktion

$$\text{rect}(x) = \begin{cases} 1 & , \text{ wenn } |x| \leq x_{\text{res}}, \\ 0 & , \text{ wenn } |x| > x_{\text{res}}, \end{cases} \quad (5.32)$$

gefaltet wird. So bleiben Delokalisierung und Korrelation der Pixel nur noch auf den Bereich $\Delta x = 2x_{\text{res}}$ beschränkt. Bei der praktischen Umsetzung des Filters wird jedoch anstatt des inkommensurablen, da auf die Bildgröße begrenzten sinc-Filters, die diskrete Fouriertransformierte der Rechteckmaske zum Ausschneiden des Seitenbandes benutzt, wobei zusätzlich der Bereich des Zentralbandes mit einem Butterworth-Filter gedämpft wird (WOLF 2010).

Das sinc-Filter besitzt gegenüber dem Butterworth-Filter den Vorteil, aufgrund der schwächeren Korrelation der rekonstruierten Pixel in der rekonstruierten Phase, feinere Objektdetails sichtbar zu machen. Um den Effekt auf die Deformationskarte zu untersuchen, wird die bereits bekannte SiGe-Schicht auf Si-Substrat als Testobjekt verwendet. Abbildung 5.16a zeigt das entsprechende (004)-DF-Hologramm. Für die Rekonstruktion wird einerseits ein Butterworth-Filter fünfter Ordnung gewählt (Abb. 5.16b), andererseits ein sinc-Filter (Abb. 5.16e). Der Radius der Filtermasken beträgt $q_0 = 1/4.1 \text{ nm}$. Man erhält

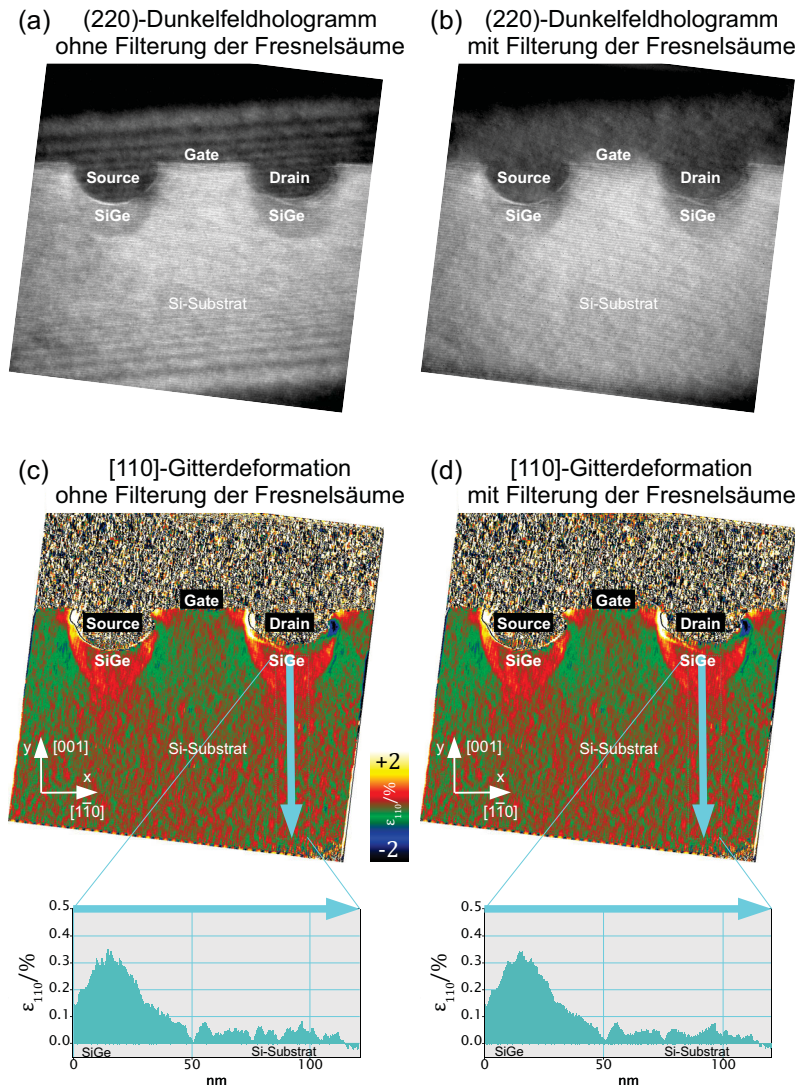


Abbildung 5.15: (220)-DF-Hologramm: a) ohne b) mit Fresnefilterung. Deformationskarten der [110]-Gitterdeformation ε_{110} rekonstruiert aus: c) ungefiltertem und d) gefiltertem DF-Hologramm.

die rekonstruierten Phasenverteilungen in Abbildung 5.16d und 5.16e. Das Rauschen in den Phasenverteilungen wird über die Standardabweichung in den gekennzeichneten Rechtecken bestimmt; es ergibt sich für das Butterworth-Filter $\sigma_\varphi = 0.256$ und für das sinc-Filter $\sigma_\varphi = 0.228$, ein um 10 % niedrigeres Rauschlevel. Da sich die Deformationskarten durch Ableiten der Phasenverteilungen ergeben, überträgt sich das Rauschverhalten entsprechend. Aus den Deformationskarten in Abbildung 5.16f und 5.16g wurde wiederum das Rauschen $\sigma_{\varepsilon_{yy}}$ der Deformationsverteilung in den gleichen Bereichen des Si-Substrats bestimmt, wie zuvor das Rauschen der Phasenverteilungen. Für das Butterworth-Filters beträgt das Rauschen $\sigma_{\varepsilon_{yy}} = 0.001$ und für den sinc-Filters $\sigma_{\varepsilon_{yy}} = 0.0009$. Also führt das sinc-Filter nicht zu einer signifikanten Verringerung des Rauschens in der Deformationskarte. Jedoch besitzt das Rauschen eine unterschiedliche Struktur: Für das Butterwoth-Filter ergibt sich aufgrund der starken Korrelation der Pixel in der Deformationskarte deutlich sichtbar eine Speckle-Noise. Beim sinc-Filter ist das Rauschen feiner strukturiert und die Deformationskarte wirkt optisch glatter.

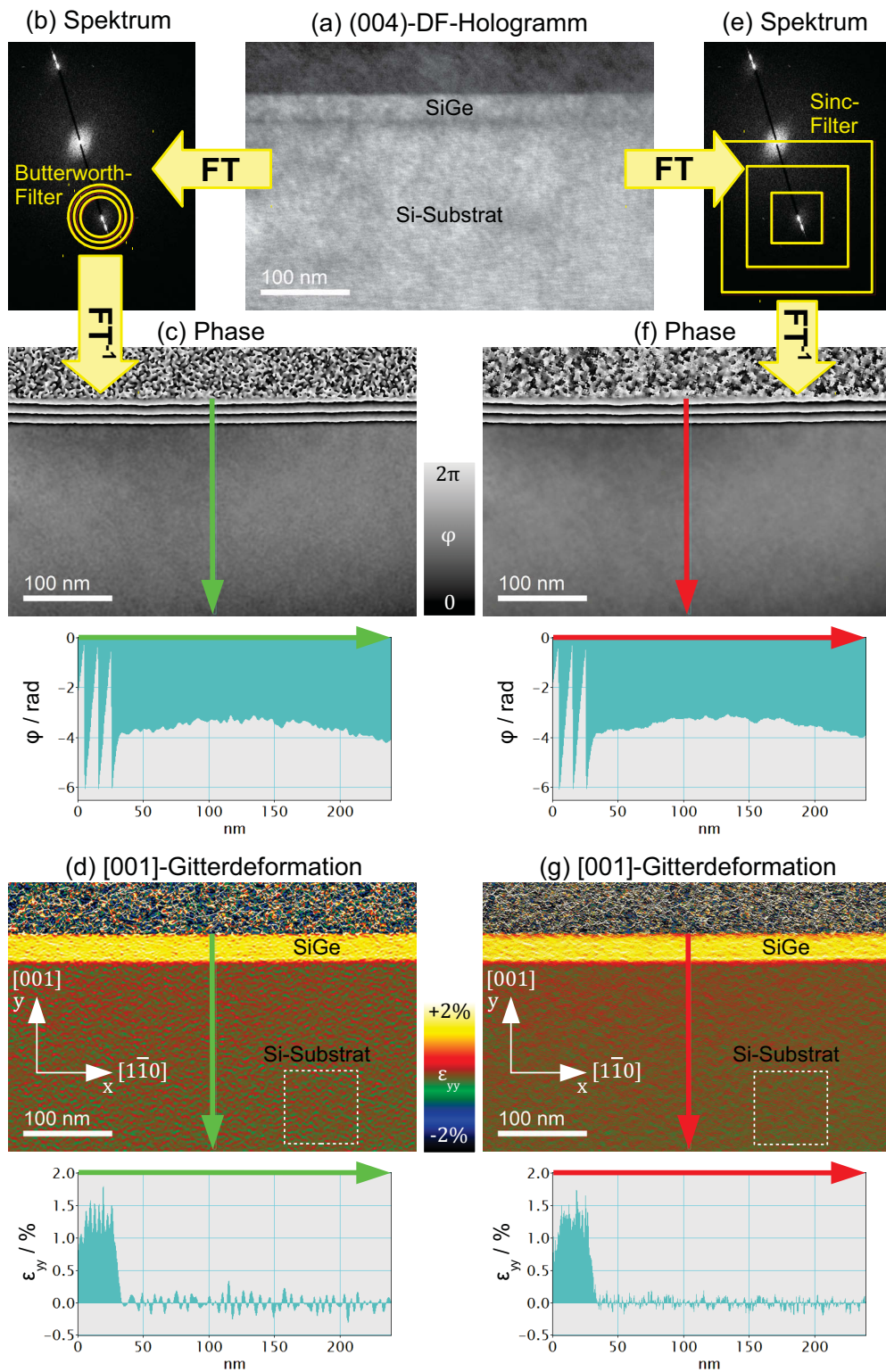


Abbildung 5.16: Wahl der Rekonstruktionsmaske. a) (004)-DF-Hologramm von SiGe-Schicht auf Si-Substrat. b) Spektrum: Ausschneiden des Seitenbands +1 mit Butterworthfilter. Gelbe Linien markieren Verlauf der Filterfunktion; mit wachsendem Radius: 90 %, 50 %, 10 % des Maximalwerts. c) Spektrum: Ausschneiden des Seitenbands +1 mit sinc-Filter. Gelbe Linien markieren Nullstellen des sinc-Filters. d) und e) Entsprechende rekonstruierte Phase mit Linienprofil. d) und g) [001]-Gitterdeformation abgeleitet aus d) und e) mit Linienprofil. In den gekennzeichneten Rechtecken wird das Rauschen bestimmt und verglichen.

5.4.4 Filterung der Hologrammintensität mit Wiener-Filter

Rauschen in der rekonstruierten Phase des DF-Hologramms limitiert die Signalaufösung in der abgeleiteten Deformationskarte und erschwert die Interpretierbarkeit der Deformationsmessung. So kann es, insbesondere bei flachen Phasengradienten, verursacht durch kleine Deformationen, vorkommen, dass nach Ableiten der rekonstruierten Phase, die Ableitung des Rauschens größer ist, als das eigentliche Deformationssignal, die Ableitung des Phasengradienten. Generell verschlechtert die Ableitung der Phasenverteilung das Signal-Rausch-Verhältnis in der Deformationskarte. Um diesem Effekt entgegenzuwirken, liegt es nahe, eine Rauschfilterung des verrauschten Phasensignals vorzunehmen. Die Möglichkeit, die verrauschte Phase nach der Rekonstruktion unmittelbar vor dem Ableiten zu glätten, soll in Abschnitt 5.9 besprochen werden. Dagegen wird in diesem Abschnitt die Filterung des aufgezeichneten Hologramms vor der Rekonstruktion mittels Wiener-Filter (WIENER 1949) erläutert.

Das Wiener-Filter wird bereits seit längerem zur Rausch-Filterung hochaufgelöster TEM-Aufnahmen verwendet (MARKS 1996). Vor kurzem konnte gezeigt werden, dass sich das Wiener-Filter aufgrund seiner hervorragenden Eigenschaften in Bezug auf Artefakte und Mittlung auch zur Filterung von Hochauflösungshologrammen eignet (LINCK 2010). Daher soll untersucht werden, ob das Wiener-Filter auch in der Dunkelfeldholographie zur Signalverbesserung eingesetzt werden kann. Dazu wird die Intensität des DF-Hologramms mit dem Wiener-Filter vor der Rekonstruktion gefiltert. Fehlerhafte Pixel werden zuvor nach der in Abschnitt 5.4.1 vorgestellten Methode beseitigt.

Das aufgezeichnete, verrauschte Signal besitzt die Form:

$$s_M(\mathbf{r}) = s(\mathbf{r}) + \text{noise}(\mathbf{r}). \quad (5.33)$$

Dabei wird angenommen, dass Signal $s(\mathbf{r})$ und Rauschen $\text{noise}(\mathbf{r})$ unkorreliert und additiv sind; andernfalls würde sich die Beschreibung des Wiener-Filters erheblich komplizierter gestalten. $s_M(\mathbf{r})$, $s(\mathbf{r})$ und $\text{noise}(\mathbf{r})$ sind im allgemeinen komplexe Zahlen, wie die aufgezeichnete Welle in Amplitude und Phase. Das verrauschte Signal wird zunächst fouriertransformiert:

$$S_M(\mathbf{g}) = S(\mathbf{g}) + \text{NOISE}(\mathbf{g}). \quad (5.34)$$

Die Anwendung des Filters erfolgt durch Multiplikation von $S_M(\mathbf{g})$ mit einer Filter-Maske, dem Wiener-Filter. Damit ergibt sich das gefilterte Signal zu:

$$\tilde{S}(\mathbf{g}) = S_M(\mathbf{g}) \cdot F(\mathbf{g}). \quad (5.35)$$

Der Wiener-Filter besitzt die Form:

$$F_W(\mathbf{g}) = \frac{|S_M(\mathbf{g})|^2 - |\text{NOISE}(\mathbf{g})|^2}{|S_M(\mathbf{g})|^2} = 1 - \frac{1}{|\text{SNR}(\mathbf{g})|^2}. \quad (5.36)$$

Für das Filter gilt:

$$F(\mathbf{g}) = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \text{SNR}(\mathbf{g}) < 1, \text{ d.h. } |S_M(\mathbf{g})| < |\text{NOISE}(\mathbf{g})|. \quad (5.37)$$

Zur Bestimmung des Rauschhintergrunds $\text{NOISE}(\mathbf{g})$ steht im Speziallabor Triebenber ein von LINCK (2010) entwickeltes Skript in *DigitalMicrograph* zur Verfügung. Das Programm berechnet aus der Amplitude des Spektrums und dem radialen Untergrund ein frequenzabhängiges Signalrauschverhältnis, aus dem anschließend das Filter berechnet und auf das Bild angewendet wird. Dabei wird der Untergrund für alle Frequenzanteile

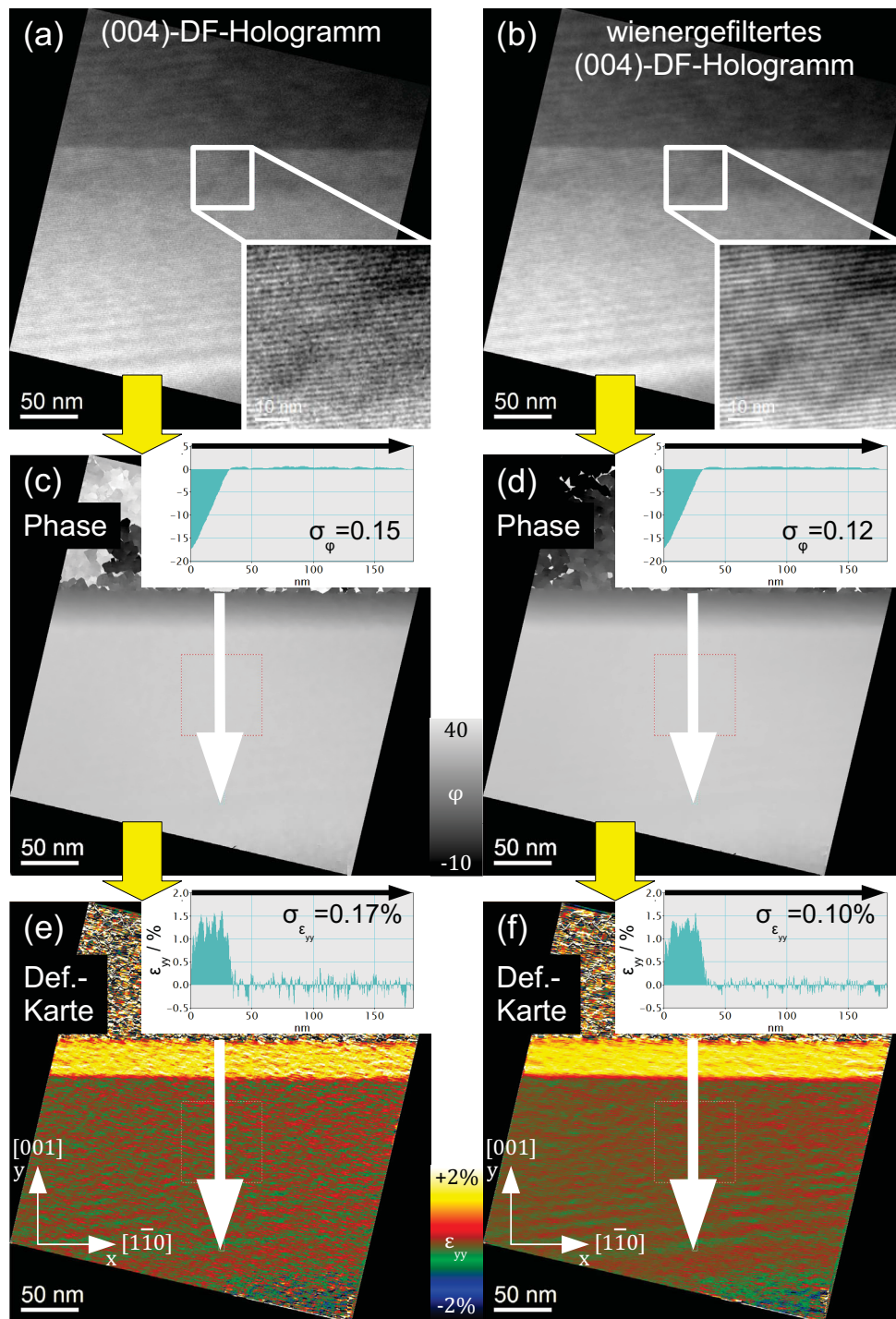


Abbildung 5.17: Einfluss der Wienerfilterung der Hologrammintensität auf die Rekonstruktion der Deformationskarte. a) Ungefiltertes, b) wienergefiltertes (004)-DF-Hologramm. Rekonstruierte Phase des c) ungefilterten, d) des gefilterten Hologramms. Deformationskarte des e) ungefilterten, f) des gefilterten Hologramms mit nahezu halbiertem Rauschen.

im Seitenband und die damit verbundenen großflächigen Objektdetails bestimmt. Dagegen lässt sich für große Objektdetails im Zentralband gewöhnlich kein sinnvoller Untergrund bestimmen, da für die radiale Mittlung zu wenig Information zur Verfügung steht. Deshalb wird der innerste Bereich des Spektrums nicht gefiltert. Nach Anwendung des Filters auf das ursprüngliche Hologrammspektrum und inverser Fouriertransformation steht die gefilterte Hologrammintensität im Ortsraum für die weitere Auswertung zur Verfügung.

Abbildung 5.17 zeigt den Vergleich zwischen einem ungefilterten und einem wienergefilterten (004̄)-DF-Hologramm der bereits häufiger als Testobjekt eingesetzten SiGe-Schicht auf Si-Substrat. In dem ungefilterten Hologramm in Abbildung 5.17a beobachtet man ein deutlich höheres Rauschen als in dem gefilterten Hologramm in Abbildung 5.17b. Nach der Rekonstruktion besitzt die Phase des ungefilterten Hologramms jedoch ein nur leicht höheres Rauschen $\sigma_\varphi = 0,15$ als die Phase des wienergefilterten Hologramms mit $\sigma_\varphi = 0,12$. Die Vorteile der Wienerfilterung kommen hier noch nicht so deutlich zur Geltung. Dies ändert sich, sobald man die Ableitung der Phase bildet, um die Deformationskarte zu erhalten. Die Deformationskarte des ungefilterten Hologramms besitzt mit $\sigma_{\varepsilon_{yy}} = 0,17\%$ ein fast doppelt so großes Rauschen gegenüber der Deformationskarte des wienergefilterten Hologramms mit $\sigma_{\varepsilon_{yy}} = 0,10\%$. Typischerweise konnten bei Anwendung des Wienerfilters auf DF-Hologramme bei kompletter Filterung des Untergrundes Verbesserungen in der Standardabweichung der Deformationskarte um den Faktor 1,5...2 beobachtet werden. Die Anwendung des Wiener-Filters auf die Intensität des DF-Hologramms kann also zu einer signifikanten Reduzierung des Rauschens in der rekonstruierten Deformationskarte beitragen. Die durch Anwendung des Wienerfilters zu erwartende Verschlechterung der Auflösung wirkt sich dabei praktisch nicht auf die Deformationsmessung aus. So zeigt ein Vergleich der Deformationskarten in Abbildung 5.17e und 5.17f, dass die SiGe/Si-Grenzschicht mit nahezu identischer Lateralauflösung rekonstruiert wird.

5.5 Einfluss und Korrektur von Verzeichnungen

Geometrische Verzeichnungen, die durch das Biprisma, die nicht-isoplanatischen Aberrationen der Projektivlinsen, sowie durch Verzerrungen in der Glasfaseroptik der CCD-Kamera verursacht werden, führen zu einer zusätzlichen ortsabhängigen Verschiebung der Hologrammstreifen. Diese Einflüsse können durch einen orts- und zeitabhängigen Phasenterm $\gamma(\mathbf{r}, \mathbf{q}_c)$ berücksichtigt werden. Die tatsächlich aufgezeichnete Hologrammintensität lautet:

$$I_{hol}(\mathbf{r}) = A_{roi}(\mathbf{r})^2 + A_{ref}(\mathbf{r})^2 + 2\mu A_{roi}(\mathbf{r})A_{ref}(\mathbf{r}) \times \cos \left[2\pi \mathbf{q}_c \cdot \mathbf{r} + 2\pi(\mathbf{g}_{roi} - \mathbf{g}_{ref}) \cdot \mathbf{r} + \gamma(\mathbf{r}, \mathbf{q}_c) \right]. \quad (5.38)$$

Somit ist die rekonstruierte Beugungswelle

$$\psi_g(\mathbf{r}) = \mu A_{roi} A_{ref} \exp \left[i \left(2\pi(\mathbf{g}_{roi} - \mathbf{g}_{ref}) \cdot \mathbf{r} + \gamma(\mathbf{r}, \mathbf{q}_c) \right) \right] \quad (5.39)$$

in ihrer Phase

$$\begin{aligned} \varphi_g(\mathbf{r}) &= 2\pi(\mathbf{g}_{roi} - \mathbf{g}_{ref}) \cdot \mathbf{r} + \gamma(\mathbf{r}, \mathbf{q}_c) \\ &= 2\pi \mathbf{u}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{g}_{ref} + \gamma(\mathbf{r}, \mathbf{q}_c) \end{aligned} \quad (5.40)$$

durch den Phasenterm $\gamma(\mathbf{r}, \mathbf{q}_c)$ moduliert. Damit liegt eine Überlagerung des ursprünglich durch die Verzerrung des Kristallgitters erzeugten Phasengradienten $\nabla_g \mathbf{u}_g$ mit einem künstlich durch die Verzeichnungen verursachten Phasengradienten $\nabla_g \gamma(\mathbf{r}, \mathbf{q}_c)$ vor:

$$\varepsilon_{gg} = -\frac{\nabla_g \varphi_g(\mathbf{r})}{2\pi g_{ref}} = \nabla_g \mathbf{u}_g + \frac{1}{2\pi g_{ref}} \nabla_g \gamma(\mathbf{r}, \mathbf{q}_c). \quad (5.41)$$

In diesem Abschnitt werden zwei Möglichkeiten zur Korrektur der Verzeichnungen $\gamma(\mathbf{r}, \mathbf{q}_c)$ vorgestellt. Entweder können die Verzeichnungen mittels einer leeren Welle korrigiert werden, oder das DF-Hologramm wird mit Hilfe einer Verzeichnungskarte entzerrt. Der Einfluss der Verzerrungen und die Wirksamkeit der Korrektur wird an einem Testobjekt diskutiert.

5.5.1 Verzeichnungskorrektur mittels Leerwelle

Die einfachste Art und Weise, den Phasenterm $\gamma(\mathbf{r}, \mathbf{q}_c)$ der Verzeichnungen zu bestimmen, ist die Aufzeichnung eines Leerhologramms. Dabei handelt es sich um ein Referenzhologramm, dass ohne Objekt im Vakuum unter Hellfeldbeleuchtung aufgenommen wird. Dabei ist es wichtig, identische Beleuchtungsbedingungen bei der Aufnahme von Dunkelfeld- und Leerhologramm einzuhalten, d.h. Position des Hologramms relativ zum Objekt, Streifenabstand und Hologrammbreite müssen unverändert bleiben. Das Leerhologramm besitzt die Gestalt:

$$I_{leer}(\mathbf{r}) = 2A_0^2 + 2\mu A_0^2 \cos [2\pi \mathbf{q}_c \cdot \mathbf{r} + \gamma(\mathbf{r}, \mathbf{q}_c)] \quad (5.42)$$

und erlaubt die Rekonstruktion einer leeren Welle

$$\psi_{leer}(\mathbf{r}) = \mu A_0^2 \exp [i\gamma(\mathbf{r}, \mathbf{q}_c)]. \quad (5.43)$$

Wird nun die rekonstruierte, verzeichnete Beugungswelle

$$\psi_g(\mathbf{r}) = \mu A_{roi} A_{ref} \exp \left[i \left(2\pi (\mathbf{g}_{roi} - \mathbf{g}_{ref}) \cdot \mathbf{r} + \gamma(\mathbf{r}, \mathbf{q}_c) \right) \right] \quad (5.44)$$

durch die leere Welle dividiert, erhält man die normierte, phasenkorrigierte Beugungswelle

$$\begin{aligned} \psi_{g,corr} &= \frac{\psi_g}{\psi_{leer}} = \frac{\mu A_{roi} A_{ref} \exp \left[i \left(2\pi (\mathbf{g}_{roi} - \mathbf{g}_{ref}) \cdot \mathbf{r} + \gamma(\mathbf{r}, \mathbf{q}_c) \right) \right]}{\mu A_0^2 \exp [i\gamma(\mathbf{r}, \mathbf{q}_c)]} \\ &= \frac{A_{roi} A_{ref}}{A_0} \exp \left[i \left(2\pi (\mathbf{g}_{roi} - \mathbf{g}_{ref}) \cdot \mathbf{r} \right) \right]. \end{aligned} \quad (5.45)$$

Die Rekonstruktionsprozedur ist in Abbildung 5.18 für die (004)-Beugungswelle schematisch dargestellt. Als Testobjekt dient eine SiGe-Schicht auf Si-Substrat.

5.5.2 Verzeichnungskorrektur mittels Verzeichnungskarte

Allgemein betrachtet führen die geometrischen Verzeichnungen bei der Aufnahme eines Hologramms zu einer Verschiebung der Ortskoordinaten von der Position \mathbf{r} in dem ursprünglich unverzeichneten Bild auf die neuen Position

$$\mathbf{r}' = \mathbf{D}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{r} + \mathbf{r}_0 \quad (5.46)$$

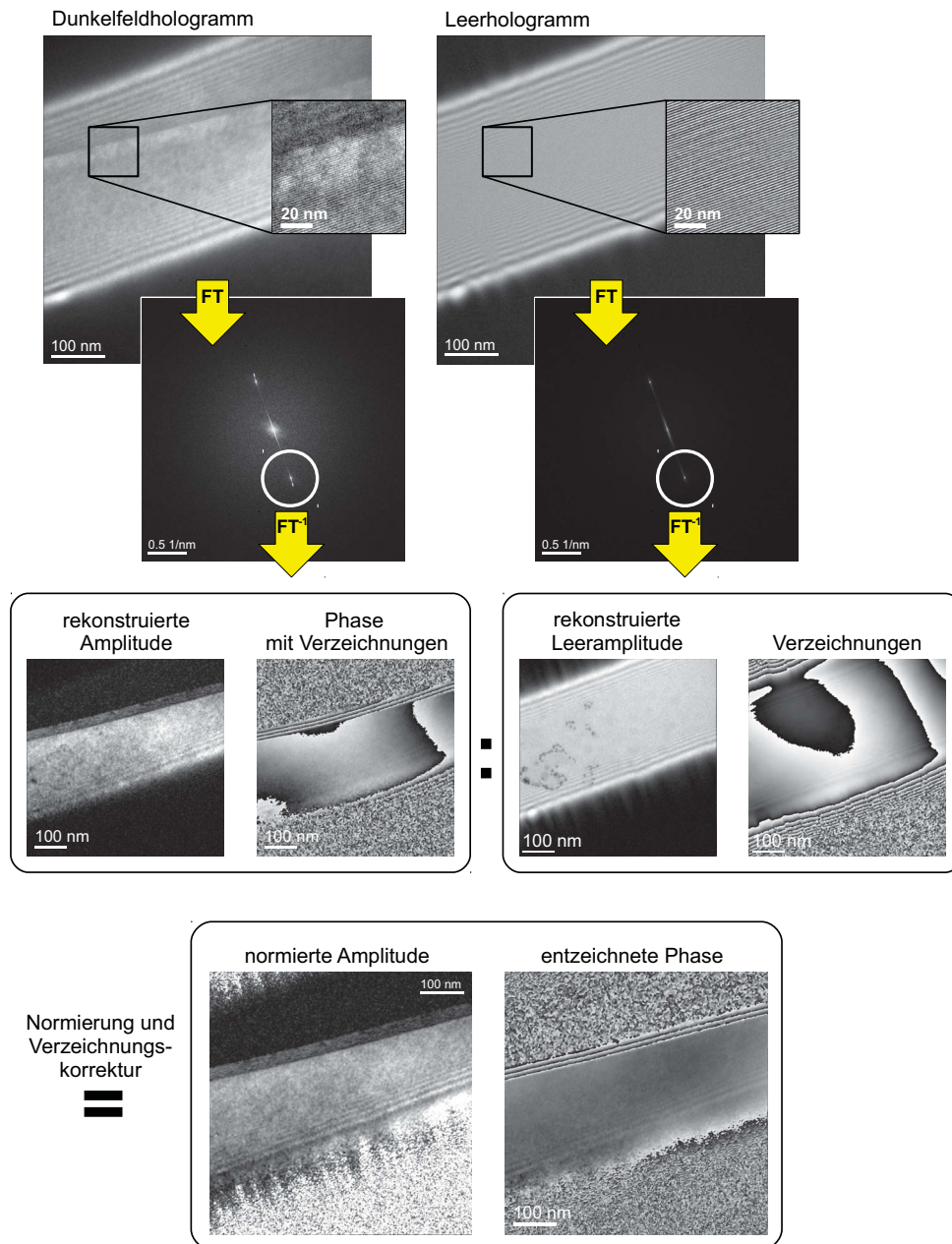


Abbildung 5.18: Holographische Rekonstruktion mit Verzeichnungskorrektur: Die Hologrammintensität wird fouriertransformiert, das Seitenband herausgeschnitten und zentriert. Nach inverser Fouriertransformation liegt eine komplexe Welle vor, die auch Artefakte durch Mikroskopeinflüsse beinhaltet. Diese können separat durch ein zweites Hologramm ohne Objekt im Hellfeldstrahlengang (= Leerhologramm) aufgenommen und rekonstruiert werden. Die Division der beiden Wellen führt zu einer normierten, phasenkorrigierten Beugungswelle.

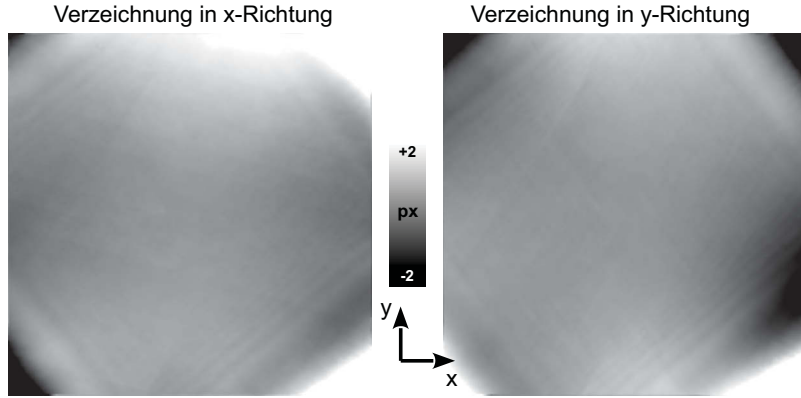


Abbildung 5.19: Verzeichnungskarten für das FEI Tecnai F20 Cs-Corr Mikroskop mit einer Gatan Multiscan CCD-Kamera mit 1024×1024 Pixeln. Das Linienmuster in den Verzeichnungskarten stammt von den Verzerrungen der Glasfaseroptik der CCD-Kamera. Die großflächigen, über das gesamte Gesichtsfeld reichenden Verzeichnungen werden durch die Projektivlinsen hervorgerufen.

in dem verzeichneten Bild. Also kann diese Verschiebung als Koordinatentransformation durch eine Matrix

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} D_{11} & D_{12} \\ D_{21} & D_{22} \end{pmatrix} \quad (5.47)$$

beschrieben werden (LUBK 2010), wobei die Determinante der Matrix $\det \mathbf{D}(\mathbf{r})$ die durch die Verzeichnung verursachte isotrope Vergrößerung angibt, und r_0 eine konstante Bildverschiebung bezeichnet, welche sich jedoch bereits im TEM korrigieren lässt. Die Koeffizienten D_{ij} der Matrix $\mathbf{D}(\mathbf{r})$ lassen sich aus Leerhologrammen bestimmen. Sei o.B.d.A. die Richtung entlang des Biprismafaden die y -Richtung, dann erfolgt die Überlagerung der leeren Teilwellen in x -Richtung, so dass die Hologrammintensität

$$\begin{aligned} I_{\text{leer}}(\mathbf{r}) &= 2A_0^2 + 2\mu A_0^2 \cos [2\pi \mathbf{q}_c \cdot \mathbf{r}'] \\ &= 2A_0^2 + 2\mu A_0^2 \cos [2\pi \mathbf{q}_c \cdot (\mathbf{r} + \mathbf{D}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{r})] \\ &= 2A_0^2 + 2\mu A_0^2 \cos [2\pi q_c (x + D_{11}x + D_{12}y)] \end{aligned} \quad (5.48)$$

die Rekonstruktion der leeren Welle

$$\begin{aligned} \psi_{\text{leer}}(\mathbf{r}) &= \mu A_0^2 \exp [i2\pi q_c (D_{11}x + D_{12}y)] \\ &\equiv \mu A_0^2 \exp [i\gamma(\mathbf{r}, \mathbf{q}_c)]. \end{aligned} \quad (5.49)$$

erlaubt. Dabei verdeutlicht Gleichung 5.49 die Äquivalenz der Matrixdarstellung zu der vorherigen Beschreibung der Verzeichnungen mit dem orts- und zeitabhängigen Phasenterm in Abschnitt 5.5.1:

$$\gamma(\mathbf{r}, \mathbf{q}_c) \equiv 2\pi q_c (D_{11}x + D_{12}y). \quad (5.50)$$

Jedoch zeigt sich hier auch, dass die Hologrammintensität in Gleichung 5.48 nur die Verzeichnungen (D_{11}, D_{12}) in x -Richtung detektiert. Also lassen sich mit der im vorigen Abschnitt 5.5.1 vorgestellten Korrekturmethode mittels Leerhologramm die Verzeichnungen nicht vollständig korrigieren. Um alle Koeffizienten der Matrix $\mathbf{D}(\mathbf{r})$ zu bestimmen, muss ein zweites, zum ersten senkrecht orientiertes Leerhologramm aufgezeichnet werden, das die Verzeichnungen (D_{21}, D_{22}) in y -Richtung enthält. In der Praxis nimmt man dazu zwei Serien zu je 50...100 Leerhologrammen im Winkel von ca. 90° auf. Aus den Serien lassen sich zwei gekreuzte, gemittelte Leerwellen rekonstruieren. Dabei reduziert die Mittlung das Rauschen

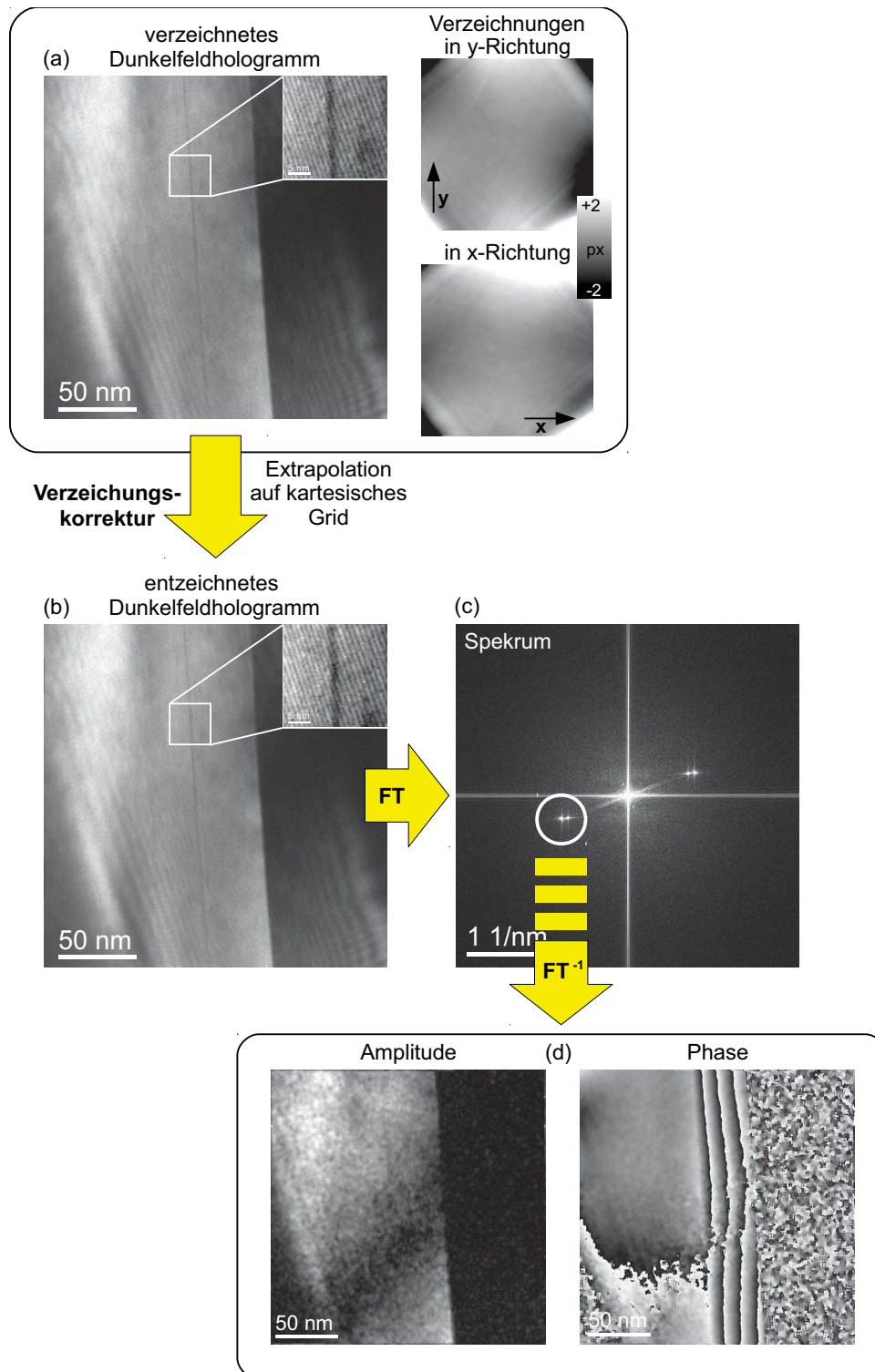


Abbildung 5.20: Korrektur der geometrischen Verzeichnungen in einem DF-Hologramm mit Hilfe von Verzeichnungskarten. a) Verzeichnetes DF-Hologramm: Aufgrund der geometrischen Verzeichnungen im TEM liegt eine Verschiebung der Pixelpositionen gegenüber den ursprünglichen, unverzeichneten Positionen vor. Die Größe der Verschiebung in x - und y -Richtung kann in Form von Verzeichnungskarten bestimmt werden. b) Entzeichnetes DF-Hologramm: Die unverzeichneten Pixelpositionen können durch eine Extrapolation der um die Verschiebung korrigierten verzeichneten Positionen auf das kartesische Grid der CCD-Kamera bestimmt werden. c) Die Rekonstruktion der Beugungswelle erfolgt mit klassischer Fourieranalyse. Aus dem Spektrum wird das Seitenband SB+1 ausgeschnitten und zentriert. d) Die inverse Fouriertransformierte des zentrierten Seitenbandes SB+1 liefert die rekonstruierte Beugungswelle in Amplitude und Phase.

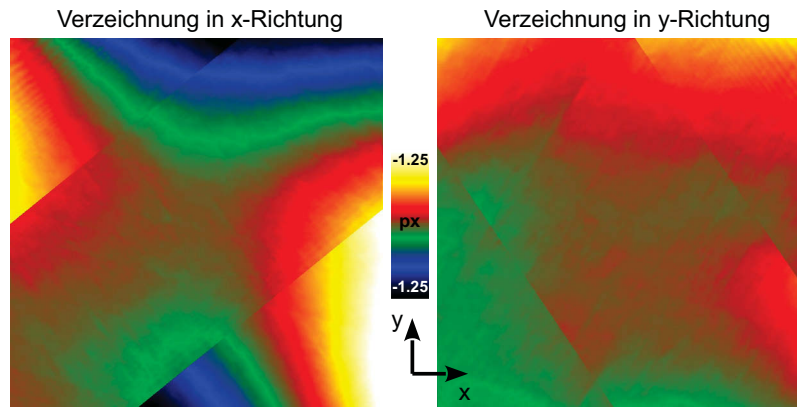


Abbildung 5.21: Verzeichnungskarten für einen Abbildungsstrahlengang am Tecnai F20 für ein holographisches Gesichtsfeld $w_{hol} = 800\text{ nm}$ bei einer Lateralauflösung $q_{res} \approx 10\text{ nm}^{-1}$. Da die geringe Hologrammbreite w_{hol} nicht erlaubt, das Gesichtsfeld der CCD-Kamera $FOV = 1000\text{ nm}$ vollständig abzudecken, wurden die Verzeichnungskarten aus jeweils drei aneinandergesetzten Serien von Leerhologrammen erstellt. An den Stellen, wo die Phasen zusammengesetzt wurden, treten jedoch Unstetigkeiten in der Phasenverteilung auf.

in den Leerwellen. Aus den beiden gekreuzten Leerwellen lassen sich die geometrischen Verzeichnungen bzgl. des unverzeichneten kartesischen Grids der CCD-Kamera bestimmen. Abbildung 5.19 zeigt die Verzeichnungen in x - und y -Richtung in der Einheit Pixel für den Holographiestrahlgang mit Objektivlinse HR43. Solche Verzeichnungskarten erlauben, die Verzeichnungen in einem Hologramm bereits vor der Rekonstruktion zu korrigieren, indem die verzeichneten Positionen im aufgezeichneten Hologramm auf die neuen unverzeichneten Positionen des kartesischen Grids der CCD-Kamera interpoliert werden. Hierzu wurde ein kurzes Skript in *DigitalMicrograph* geschrieben, wobei sich die neuen Positionen aus den alten Positionen und den zuvor bestimmten Verzeichnungen ergeben. Allerdings erzeugt die Interpolation abhängig von der verwendeten Methode selbst wieder Artefakte. Deren Einfluss ist jedoch geringer als der durch die Verzeichnungen hervorgerufene. Abbildung 5.20 erläutert Entzeichnung und anschließenden Rekonstruktionsprozess an dem Beispiel eines DF-Hologramms einer SiGe-Schicht auf Si-Substrat.

5.5.3 Vergleich der Korrekturmethode

Beide Korrekturmethode, ob Leerwelle oder Verzeichnungskarte, besitzen Vor- und Nachteile, welche ihre Anwendungsmöglichkeiten einschränken.

Leerhologramm

Die Korrektur mittels Leerwelle ist eine bereits seit langem in der Hellfeld off-axis Elektronenholographie angewandte Technik und funktioniert vollkommen analog. Sie ist einfach und schnell durchzuführen. Eine wichtige Voraussetzung besteht darin, dass die Aufnahme des Leerhologramms unter den gleichen Bedingungen erfolgt wie die Aufnahme des Objekthologramms. Wenn das TEM korrekt justiert ist und die Aufnahme der DF-Hologramme in gekippter Dunkelfeldbeleuchtung erfolgt, kann problemlos zwischen Hell- und Dunkelfeldbeleuchtung gewechselt werden. Dann sollten auch die Beleuchtungsbedingungen annähernd identisch sein. Allerdings wird am TEM selten eine leichte Verschiebung von Beleuchtung und Interferenzfeld bei Wechsel von Dunkel- zu Hellfeldbedingungen beobachtet. Zusätzlich können aufgrund von Limitierungen

bei der Beleuchtungsskippping (Abschnitt 5.3.4.1) nicht alle DF-Hologramme mit gekippter Dunkelfeldbeleuchtung aufgezeichnet werden. Dann treten beim Wechsel von Dunkel- zu Hellfeld zwangsläufig Verschiebungen in der Beleuchtung auf. In diesem Fällen ist fraglich, in wie weit die Aufnahmebedingungen von Objekt- und Leerhologramm noch als identisch angesehen werden können. Überhaupt ist es umständlich, direkt nach jeder Aufnahme eines DF-Hologramms gleich ein Leerhologramm im Hellfeld aufzuzeichnen und anschließend zur Dunkelfeldbeleuchtung zurückzukehren. Daher werden im Experiment meist einige Leerhologramm vor und nach der Aufnahme mehrerer DF-Hologramme aufgezeichnet. Als weitere Nachteile der Korrekturmethode mittels Leerhologramm existieren: Die Verzeichnungen parallel zum Biprisma werden nicht aufgezeichnet. Die Division durch die Leerwelle erhöht das Rauschen in der rekonstruieren Phasen- bzw. Deformationsverteilung.

Verzeichnungskarte

Durch die Korrektur mittels Verzeichnungskarte lassen sich einige Nachteile des Leerhologramms vermeiden. Tatsächlich erlaubt erst diese Methode eine vollständige Korrektur der Verzeichnungen parallel und senkrecht zum Biprisma. Dies ist wichtig, da es oft vorkommt, dass zur Bestimmung der Deformationsverteilung die Ableitung der Phasenverteilung in eine Richtung erfolgt, die zumindest anteilig parallel zum Biprisma zeigt, also in eine Richtung, in der die Verzeichnungen mittels Leerhologramm nicht korrigiert werden können. Dies ist nur solange unkritisch, wie die Ableitung der Phase in die Richtung senkrecht zum Biprisma erfolgt, z.B. in Abbildung 5.18, wo die Phase der (004)-Beugungswelle mit Hilfe der Leerwelle in [001]-Richtung entzeichnet wird. Wollte man in gleicher Weise die Phase der (220)-Beugungswelle korrigieren, würde man mit der Leerwelle wiederum nur die Verzeichnungen in [001]-Richtung erfassen, nicht aber in [110]-Richtung. Der Vorteil von Verzeichnungskarten ist, dass die Bestimmung der Verzeichnungen unabhängig von der Aufnahme der DF-Hologramme erfolgt. Theoretisch lassen sich die Verzeichnungen einmalig bestimmen und zur Korrektur aller zukünftigen Hologramme verwenden. In der Realität muss man jedoch davon ausgehen, dass die Verzeichnungen über einen längeren Zeitraum nicht stabil bleiben. Leider konnte dies nicht getestet werden, da die $1k \times 1k$ -CCD-Kamera am *Tecnai F20* TEM in Verlauf dieser Arbeit gegen eine $2k \times 2k$ -CCD-Kamera ausgetauscht wurde. Dies zeigt einen weiteren Nachteil: Verzeichnungskarten müssen für jede Anregung der Projektive und die verwendete CCD-Kamera individuell erstellt werden. So erfasst Abbildung 5.19 nur die Verzeichnungen für den Holographiestrahlangang mit Objektivlinse HR43. Beim Versuch, eine Verzeichnungskarte für den Holographiestrahlangang pLL50 zu erstellen, trat ein weiteres Problem auf. Bei pLL50 ist das Gesichtsfeld der Kamera größer als das holographische Gesichtsfeld. Also kann man mit zwei senkrechten Leerhologrammserien nicht das gesamte Gesichtsfeld überdecken. Daher wurden in jeder der beiden senkrechten Richtungen jeweils drei Leerhologrammserien aufgenommen, eine im Zentrum des Gesichtsfeldes, die anderen leicht nach rechts und links versetzt. Die rekonstruierten Phasen wurden aneinandergesetzt, so dass eine Verzeichnungskarte des gesamten Gesichtsfeldes entsteht. Wie Abbildung 5.21 verdeutlicht, treten Unstetigkeiten zwischen den aneinandergesetzten Phasenbildern auf. Aufgrund dieser Probleme konnte die Verzeichnungskorrektur für den Holographiestrahlangang pLL50 nur mittels Leerhologramm erfolgen.

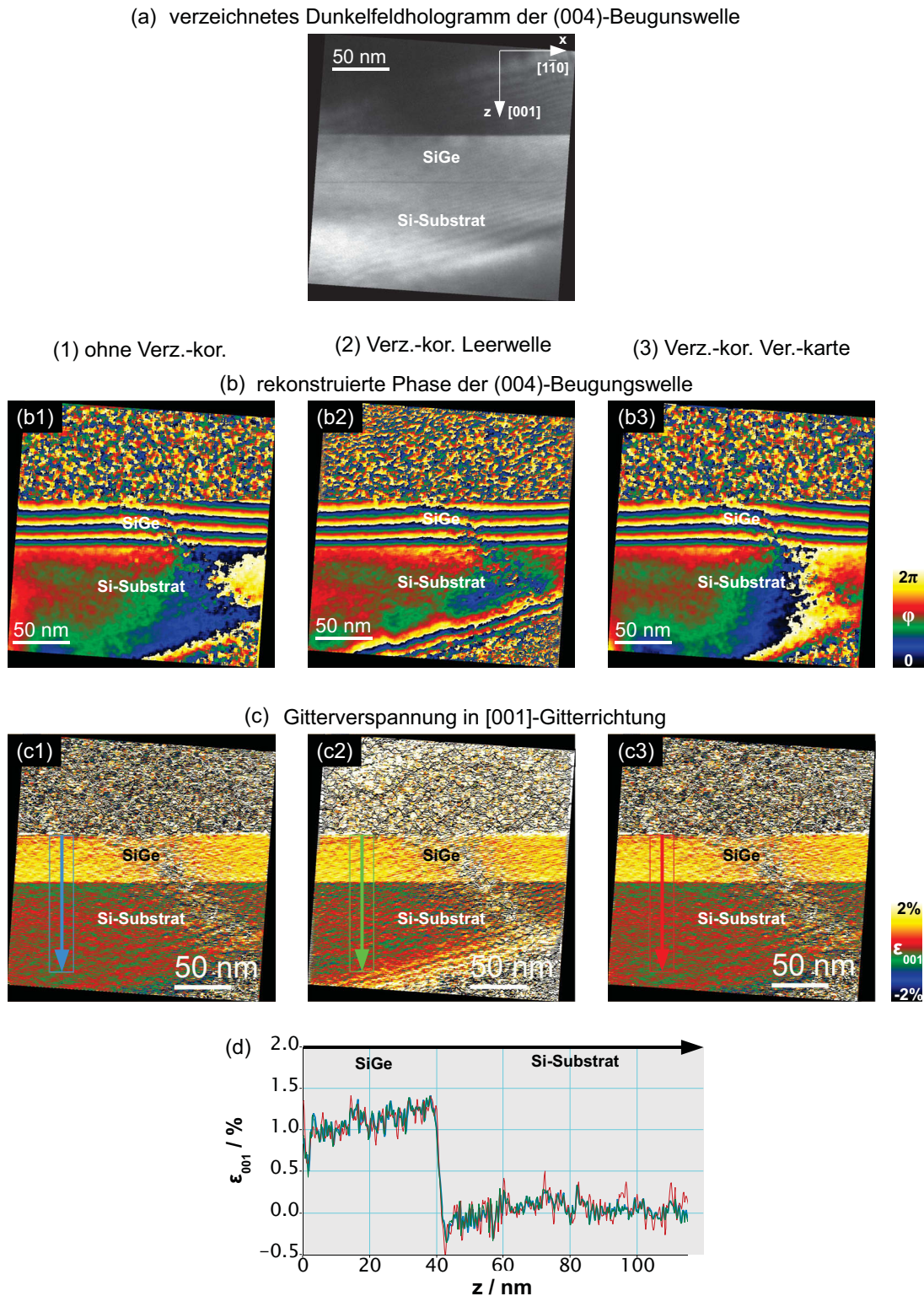


Abbildung 5.22: Vergleich von Methoden zur Korrektur der Verzeichnungen in einem DF-Hologramm. a) DF-Hologramm der (004)-Beugungswelle an einer SiGe-Schicht auf Si-Substrat. b) Rekonstruierte Phase der (004)-Beugungswelle: b₁) ohne Korrektur der Verzeichnungen, b₂) mit Korrektur der Verzeichnungen durch ein Leerhologramm, b₃) mit Korrektur der Verzeichnungen durch Verzeichnungskarten. c) Gitterverspannung ϵ_{001} in [001]-Richtung bestimmt aus dem Gradienten der rekonstruierten Phasen in b₁₋₃). d) Verlauf Gitterverspannung ϵ_{001} von der SiGe-Schicht in das Si-Substrat entlang der in c₁₋₃) gekennzeichneten Linienprofile.

Einfluss auf Deformationsmessung

Abschließend soll geklärt werden, welchen Einfluss die Verzeichnungen auf die Deformationsmessung besitzen, und welche der beiden Methoden zur Verzeichnungskorrektur besser geeignet ist. Aus Abbildung 5.20 lässt sich ablesen, dass die Verzeichnungen in HR43 maximal ± 1 Pixel in x - und y -Richtung betragen, was äußerst gering ist. Um einen Vergleich der Methoden durchführen zu können, wird ein (004)-DF-Hologramm an dem bekannten Testobjekt, einer SiGe-Schicht auf Si-Substrat, mit dem Holographiestrahlangang HR43 aufgezeichnet. Daraus wird die Phase (004)-Beugungswelle rekonstruiert und die [001]-Gitterdeformation ε_{001} in [001]-Richtung abgeleitet. Dabei werden drei Fälle unterschieden: 1. ohne Verzeichnungskorrektur, 2. Korrektur mittels Leerhologramm und 3. Korrektur mit den Verzeichnungskarten aus Abbildung 5.20. Die Ergebnisse lassen sich in Abbildung 5.22 betrachten. Die rechte Hälfte der rekonstruierten Phasen- bzw. Deformationsverteilung zeigt einen Artefakt (Biegekontur) aufgrund dynamischer Beugung. Da in diesem Bereich Intensität und Streifenkontrast niedriger sind als im übrigen Hologramm, ist das Bildrauschen erhöht und der Bereich ist nicht interpretierbar. Daher können nur die Phasenverteilungen in der linken Bildhälfte verglichen werden. Dabei lassen sich kaum Unterschiede zwischen den Phasenverteilungen ausmachen. Dieser Eindruck überträgt sich auf die Deformationsverteilungen. Vergleicht man die Profile von der SiGe-Schicht ins Si-Substrat, stellt man fest, dass der Verlauf der drei Profile ohne oder mit Verzeichnungskorrektur identisch ist. Also ist der Einfluss der Verzeichnungen auf die Deformationsmessung in diesem Beispiel gering. Dies deckt sich mit der Beobachtung aus Abbildung 5.20, dass die Verzeichnungen der einzelnen Pixel der CCD-Kamera über das gesamte Gesichtsfeld betrachtet weniger als ± 1 Pixel betragen. Das bedeutet, die zusätzlichen Phasengradienten, die durch die Verzeichnungen der Projektive und die Szintillatoroptik der CCD-Kamera hervorgerufen werden, sind deutlich kleiner als die Phasengradienten, die durch die Gitterdeformation hervorgerufen werden. In diesem Fall kann auf eine Verzeichnungskorrektur verzichtet werden (BÉCHÉ *et al.* 2011). Vor einem generellen Verzicht einer Verzeichnungskorrektur sollten die Verzeichnungen jedoch einmal individuell für jedes Mikroskop, d.h. für den benutzten Strahlengang und die CCD-Kamera experimentell bestimmt werden. Dann erst kann entschieden werden, ob es gerechtfertigt ist, auf eine Korrektur zu verzichten. Hierbei muss auch berücksichtigt werden, dass die Größe der Phasengradienten von der Stärke der Gitterdeformation abhängt. So beträgt in dem Beispiel der Unterschied zwischen der Gitterkonstante der SiGe-Schicht und dem Si-Substrat $\varepsilon_{001} = 1,3\%$. Der Phasengradient ist entsprechend groß. Will man kleinere Deformationen untersuchen, kann der Phasengradient durchaus kleiner und der Einfluss der Verzeichnungen entsprechend relativ größer sein. Um Probleme dieser Art zu vermeiden, wird in dieser Arbeit jedes DF-Hologramm zumindest mittels Leerhologramm von den Verzeichnungen befreit.

Das Rauschlevel in der SiGe-Schicht lässt sich für alle drei Profile identisch zu $\Delta\varepsilon_{001} = \pm 0,1\%$ abschätzen. Im Si-Substrat beobachtet man unterschiedliche Rauschlevel: Ohne Verzeichnungskorrektur stellt man ein geringeres Rauschen $\Delta\varepsilon_{001} = \pm 0,05\%$ fest als mit $\Delta\varepsilon_{001} = \pm 0,1\%$, wobei egal ist, welche der beiden Methoden angewendet wird. Bei der Korrektur mit einer Leerwelle erhöht sich das Rauschen, weil zwei verrauschte Welle durcheinander dividiert werden. Bei der Korrektur mittels Verzeichnungskarte erwartet man ein geringeres Rauschen als bei der Korrektur mittels Leerhologramm, da die Verzeichnungskarten aus gemittelten Leerwellen erstellt sind. Dieser Effekt lässt sich allerdings nicht bestätigen.

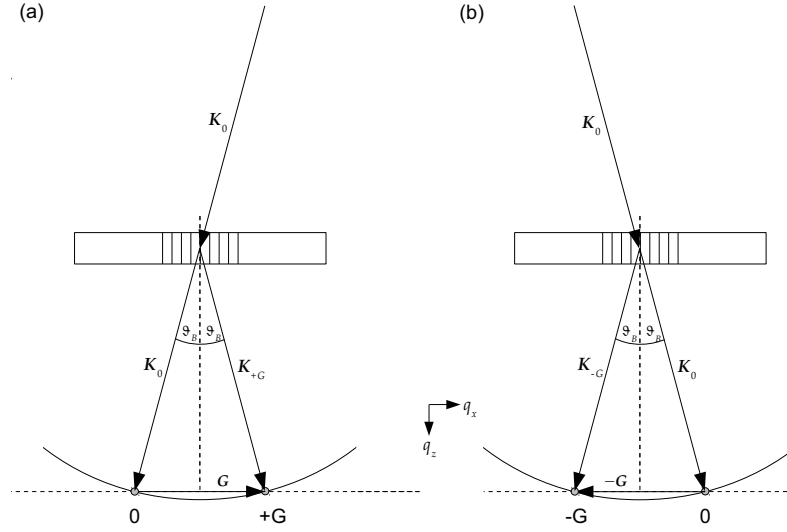


Abbildung 5.23: Anregung des Beugungsreflexes in Abhängigkeit von der Kippung des einfallenden Strahls: a) Anregung des $+G$ -Reflexes, b) des $-G$ -Reflexes.

5.6 Vorzeichen der Beugungswelle

Wie die Ewald-Konstruktion in Abbildung 5.23 skizziert, kann eine einfallende Elektronenwelle mit dem Wellenvektor $\mathbf{K}_0 = (k_{x0}, k_{y0}, k_{z0})^T$ an den Netzebenen des Kristalls abhängig von der Einfallsrichtung entweder in die Richtung $\mathbf{K}_{+G} = \mathbf{K}_0 + \mathbf{G}$ oder in die Richtung $\mathbf{K}_{-G} = \mathbf{K}_0 - \mathbf{G}$ gebeugt werden. Die Wellenvektoren der beiden Beugungswellen besitzen den gleichen Betrag $|\mathbf{K}_{+G}| = |\mathbf{K}_{-G}|$, zeigen jedoch in unterschiedliche Richtungen, wobei sich \mathbf{K}_{+G} durch Spiegelung von \mathbf{K}_{-G} an der q_z -Achse ergibt. Im Spektrum beobachtet man entweder den Beugungsreflex $+G$ oder $-G$. Die zugehörigen Beugungswellen in der Austrittsfläche des Kristalls lauten:

$$\begin{aligned}\psi_{+g} &= A_{+g} \exp[-i2\pi(\mathbf{k}_0 + \mathbf{g}) \cdot \mathbf{r}], \\ \psi_{-g} &= A_{-g} \exp[-i2\pi(\mathbf{k}_0 - \mathbf{g}) \cdot \mathbf{r}].\end{aligned}\quad (5.51)$$

Hierin ist A_g die nicht näher betrachtete Amplitude der Beugungswellen, $\mathbf{r} = (x, y)$ der zweidimensionale Ortsvektor in der Austrittsfläche und \mathbf{k}_0 die in-plane Komponente von \mathbf{K}_0 ; $\mathbf{G} = (g_x, g_y, 0)^T = (g, 0)^T$ liegt in der Ebene senkrecht zur q_z -Achse.

Liegt in dem Kristall eine Verzerrung \mathbf{u} vor, erfahren die Beugungswellen eine entsprechende Modulation in ihren Phasen:

$$\begin{aligned}\psi_{+g} &= A_{+g} \exp[-i2\pi(\mathbf{k}_0 + \mathbf{g}) \cdot \mathbf{r} - i2\pi\mathbf{g} \cdot \mathbf{u}], \\ \psi_{-g} &= A_{-g} \exp[-i2\pi(\mathbf{k}_0 - \mathbf{g}) \cdot \mathbf{r} + i2\pi\mathbf{g} \cdot \mathbf{u}],\end{aligned}\quad (5.52)$$

wobei sie sich nur aufgrund des Vorzeichens des reziproken Gittervektors \mathbf{g} in ihren Phasen unterscheiden. Durch Überlagerung der modulierten Beugungswelle mit der entsprechenden unmodulierten Referenzwelle erlaubt, die Phasen

$$\begin{aligned}\varphi_{+g} &= -i2\pi\mathbf{g} \cdot \mathbf{u}, \\ \varphi_{-g} &= +i2\pi\mathbf{g} \cdot \mathbf{u}\end{aligned}\quad (5.53)$$

der beiden Beugungswellen zu rekonstruieren. Sie tragen die identische Information über die Verschiebung \mathbf{u} des Gitters, jedoch unterscheiden sie sich im Vorzeichen voneinander.

Das Vorzeichen der Beugungswelle muss bei der Aufzeichnung, der Rekonstruktion und zur korrekten Bestimmung der Dehnungskarte beachtet werden.

Um den Einfluss des Vorzeichens der Beugungswelle in der DFH näher zu untersuchen, wird die bekannte SiGe-Schicht auf Si-Substrat als einfach strukturiertes Testobjekt gewählt. Die SiGe-Schicht wurde epitaktisch in [001]-Richtung auf den Si-Kristall aufgewachsen. Aufgrund des Ge-Gehalts von 25 % erwartet man in dem SiGe-Mischkristall eine ca. 1,2 % größere Gitterkonstante als im Si-Substrat. Für den in [110]-Zonenachse orientierten Kristall tragen aufgrund der Symmetrie des Beugungsspektrums sowohl die (004)-Beugungswelle als auch die $(00\bar{4})$ -Beugungswelle die exakt identische Information über die Gitterdeformation bezüglich der [001]-Gitterrichtung. Daher wurde die [001]-Gitterdeformation mit Hilfe von zwei dunkelfeldholographischen Messungen bestimmt. Dazu wurde einmal die (004)-, das andere mal die $(00\bar{4})$ -Beugungswelle aufgezeichnet und rekonstruiert. Abbildung 5.24 illustriert die Durchführung der Experimente. Der zur Aufzeichnung der (004)- und $(00\bar{4})$ -Beugungswelle nötige experimentelle Aufbau wurde bereits detailliert in Abschnitt 5.1.2 erläutert. Beleuchtungsrichtung und Probenorientierung zur Anregung des (004)- bzw. des $(00\bar{4})$ -Beugungsreflexes werden jeweils so eingestellt, dass sich die jeweiligen Beugungsreflexe in der hinteren Brennebene auf der optischen Achse befinden. Im Spektrum spalten der (004)- bzw. $(00\bar{4})$ -Beugungsreflex in zwei Reflexanteile auf. Ein Reflex repräsentiert den (004)- bzw. $(00\bar{4})$ -Beugungsreflex des reinen Si-Kristalls, der andere den (004)- bzw. $(00\bar{4})$ -Beugungsreflex des SiGe-Mischkristalls. Da der SiGe-Mischkristall eine etwas größere Gitterkonstante als das Si-Substrat besitzt, ist der Abstand vom SiGe-Reflex zum Nullstrahl geringer als vom Si-Reflex zum Nullstrahl. Wird der (004)-Beugungsreflex mit einer Blende aus dem Spektrum separiert, so befindet sich, bezogen auf die nach rechts zeigende q -Achse, der SiGe-Reflex links vom Si-Reflex. Betrachtet man dagegen der $(00\bar{4})$ -Beugungsreflex, befindet sich der SiGe-Reflex links vom Si-Reflex. Die Lage der Reflexe zueinander bestimmt den Unterschied im Vorzeichen der geometrischen Phase. Wie in Abschnitt 5.2 diskutiert wurde, ist der Abstand $\Delta g = g_{SiGe} - g_{Si}$ der beiden Beugungsreflexe proportional zur Verschiebung u . Im Fall der (004)-Beugungswelle zeigt der Differenzvektor vom Si-Reflex, der Referenz, zum SiGe-Reflex in negative q -Richtung. Daraus resultiert das negative Vorzeichen in der rekonstruierten Phase $\varphi_{+g} = -i2\pi g \cdot u$. Im Fall der $(00\bar{4})$ -Beugungswelle zeigt der Differenzvektor vom Si-Reflex zum SiGe-Reflex in positive q -Richtung, so dass sich das positive Vorzeichen in der Phase $\varphi_{-g} = +i2\pi g \cdot u$ ergibt.

Auch die DF-Hologramme der (004)- bzw. $(00\bar{4})$ -Beugungswelle unterschieden sich. Der Interferenzstreifenabstand im Si-Substrat ist identisch, da in beiden Fällen jeweils die gleiche Spannung am Biprismafaden eingestellt wurde. Jedoch beobachtet man im (004)-DF-Hologramm in der SiGe-Schicht einen geringen, im $(00\bar{4})$ -DF-Hologramm einen größeren Streifenabstand als im Si-Substrat. Im Spektrum des (004)-DF-Hologramms befindet sich im Seitenband +1 der Si-Reflex rechts vom SiGe-Reflex und im Spektrum des $(00\bar{4})$ -DF-Hologramms befindet sich im Seitenband +1 der Si-Reflex links vom SiGe-Reflex. Da die numerische Maske zum Ausschneiden des Seitenbandes auf den Si-Reflex als Referenz zentriert wird, rekonstruiert man aus dem (004)-DF-Hologramm die zum Abstand $\Delta g = g_{SiGe} - g_{Si}$ vom Si- zum SiGe-Reflex proportionale Phase $\varphi_{+g} = -i2\pi g \cdot u$ und aus dem $(00\bar{4})$ -DF-Hologramm die zum Abstand $\Delta g = g_{Si} - g_{SiGe}$ proportionale Phase $\varphi_{-g} = +i2\pi g \cdot u$. So beobachtet man in der rekonstruierten Phase der (004)-Beugungswelle im Bereich der SiGe-Schicht einen Gradienten mit negativen Anstieg, während man in der rekonstruierten Phase der $(00\bar{4})$ -Beugungswelle dort einen Gradienten mit positiven Anstieg feststellt. Hierbei ist zu beachten, dass die Linienprofile in Abbildung 5.24

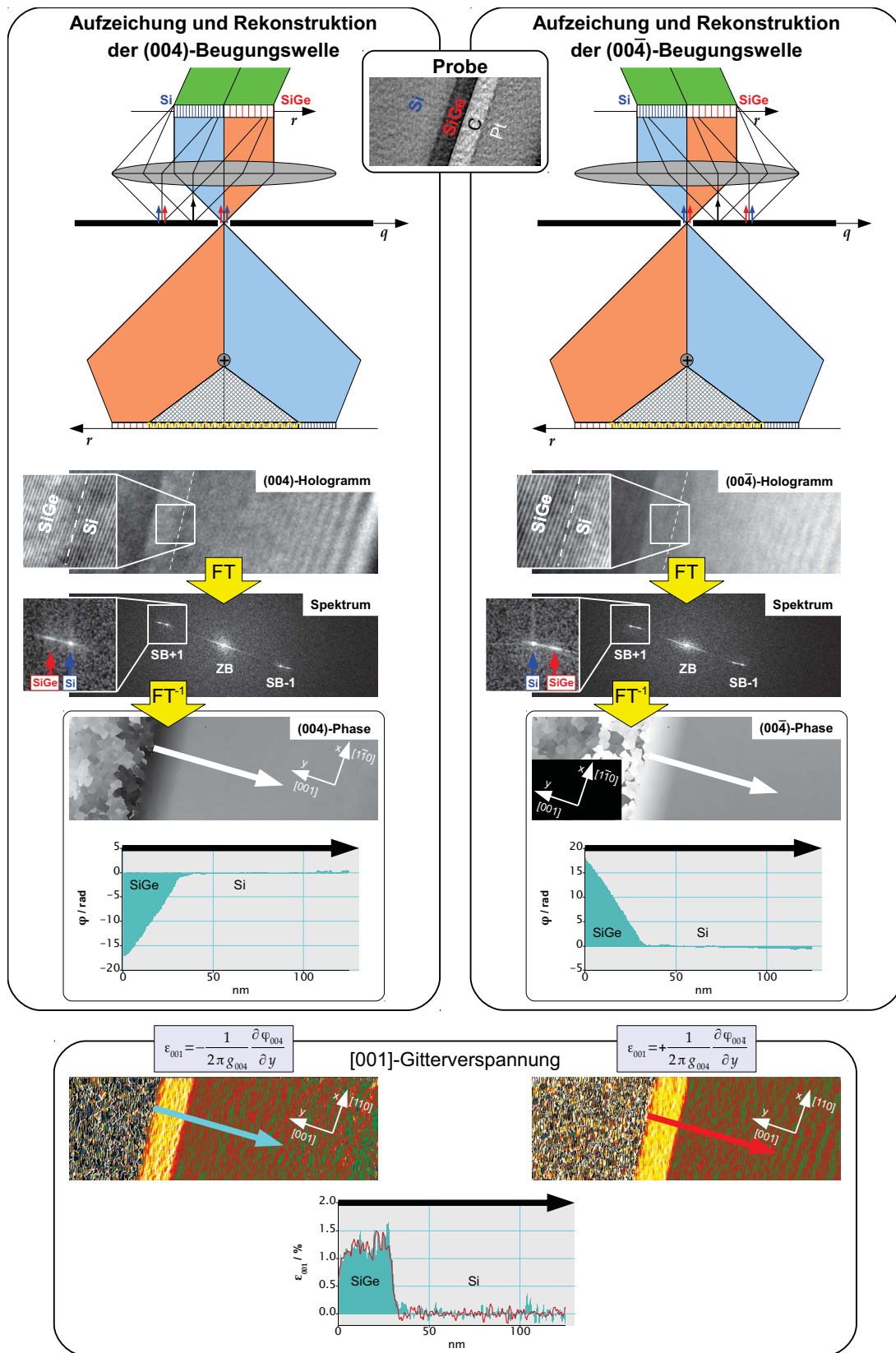


Abbildung 5.24: Illustration zur Aufzeichnung und Rekonstruktion der {004}-Beugungswellen mit anschließender Bestimmung der [001]-Gitterdeformation. Zu beachten ist der Wechsel des Vorzeichens in der Phase zwischen der (004)- und (004̄)-Beugungswelle. Weitere Erläuterungen im Haupttext.

in negative y -Richtung zeigen. Dies mag zunächst verwirrend erscheinen, folgt aber der in der Halbleitertechnologie üblichen Konvention, dass Profilschnitte immer aus Richtung der Waferoberfläche ins Substrat zeigen. Maßgeblich für die Bildung der Ableitungen und die Bestimmung der Gradienten ist aber das in der Phasenverteilung angegebene Koordinatensystem aus den Richtungen $[110] = +e_x$ und $[001] = +e_y$. Die $[001]$ -Gitterverzerrung kann nun aus der Ableitung der rekonstruierte Phase bestimmt werden.

- a) Aus der Phase des (004) -Beugungswelle φ_{004} :

$$\varepsilon_{001}(x, y) = -\frac{\nabla_y \varphi_{004}(x, y)}{2\pi |g_{004}|} e_y. \quad (5.54)$$

- b) Aus der Phase des $(00\bar{4})$ -Beugungswelle $\varphi_{00\bar{4}}$:

$$\varepsilon_{001}(x, y) = +\frac{\nabla_y \varphi_{00\bar{4}}(x, y)}{2\pi |g_{004}|} e_y. \quad (5.55)$$

Hierin bezeichnet $\nabla_y = \partial/\partial y$ den Gradienten in $[001]$ - bzw. y -Richtung, e_y den Einheitsvektor in diese Richtung und $|g_{004}|$ den Betrag des reziproken Gittervektors bzgl. der (004) -Netzebenen. Wie der Vergleich der Profilschnitte in den rekonstruierten Dehnungskarten in Abbildung 5.24 zeigt, liefern beide Experimente einen identischen Verlauf für die Dehnung zwischen dem Si-Substrat und dem SiGe-Mischkristall. Die maximale Gitterverzerrung beträgt $\varepsilon_{001} = 1,2\%$. Betrachtet man nur das reine Ergebnis, eignen sich sowohl die (004) - als auch die $(00\bar{4})$ -Beugungswelle gleichermaßen für die Dehnungsmessung. Genauso kann die Dehnung ε_{110} in $[110]$ - bzw. x -Richtung entweder aus der (220) - oder $(2\bar{2}0)$ -Beugungswelle bestimmt werden.

Der Streifenabstand in dem deformierten Kristall hängt vom Vorzeichen des Beugungsreflexes und der Art der Deformation, Streckung oder Stauchung ab. Laut Gleichung (5.6) aus Abschnitt 5.1.2 ist die Hologramminstensität proportional zu:

$$I_{hol}(\mathbf{r}) \sim \cos \left[2\pi \mathbf{q}_c \cdot \mathbf{r} + 2\pi (\mathbf{g}_{roi} - \mathbf{g}_{ref}) \cdot \mathbf{r} \right]. \quad (5.56)$$

Somit entspricht der Interferenzstreifenabstand einer vollen Periode des Kosinustusters. Sei $\mathbf{g}_{roi} < \mathbf{g}_{ref}$ (Streckung), dann ist bei der Wahl des Beugungsreflexes $+\mathbf{g}_{roi}$ die Differenz $\Delta \mathbf{g} = (\mathbf{g}_{roi} - \mathbf{g}_{ref}) < 0$. Der Streifenabstand im deformierten Kristall ist kleiner als im Referenzkristall. Dies entspricht genau dem Beispiel zwischen SiGe- und Si bei Wahl des (004) -Beugungsreflexes in Abbildung 5.24. Wählt man dagegen den Beugungsreflex $-\mathbf{g}_{roi}$, ist die Differenz $\Delta \mathbf{g} = (\mathbf{g}_{roi} - \mathbf{g}_{ref}) > 0$. Der Streifenabstand im deformierten Kristall ist kleiner als im Referenzkristall. Daher beobachtet man in Abbildung 5.24 bei Wahl des $(00\bar{4})$ -Beugungsreflexes einen größeren Streifenabstand im SiGe-Kristall als im Si-Substrat. Bei einer Stauchung $\mathbf{g}_{roi} > \mathbf{g}_{ref}$ ist das Verhalten des Streifenabstands genau umgekehrt. Da sich die Auflösung umgekehrt proportional zum Streifenabstand verhält, empfiehlt es sich, die Beugungswelle aufzuzeichnen, bei welcher der Streifenabstand im deformierten Kristall kleiner ist als im Referenzkristall. Allerdings muss darauf geachtet werden, dass im deformierten Kristall das Abtastkriterium erfüllt bleibt, also ein Hologrammstreifen von mindestens vier Pixeln der CCD-Kamera abgetastet wird. Tatsächlich sollte der Streifenabstand sogar etwas größer als das Abtastlimit gewählt werden, um sicherzustellen, dass in der Phase im deformierten Kristall alle Phasensprünge sauber rekonstruiert werden.

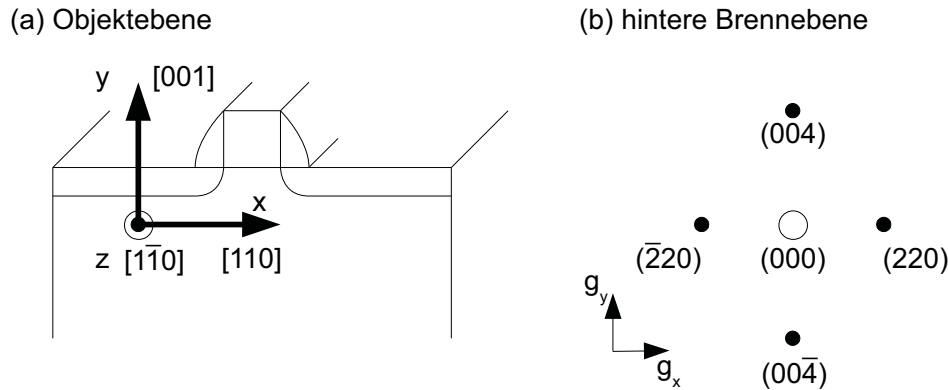


Abbildung 5.25: Technologisch relevante Richtungen für die Deformationsbestimmung in einem Silizium-(001)-Wafer spannen ein rechtshändiges Koordinatensystem auf.

Dies ist wichtig für die korrekte Funktion der Algorithmen für das *phase unwrapping* (Abschnitt 5.1.3). Hierbei hat sich ein Streifenabstand von ca. 5 px im Bereich des Si-Substrats bewährt.

Die exakte Kenntnis über das Vorzeichen der Beugungswelle wird benötigt, um das Vorzeichen der Dehnung richtig bestimmen zu können, also zu unterscheiden, ob eine Stauchung ($\epsilon < 0$) oder eine Streckung ($\epsilon > 0$) vorliegt. Besteht die untersuchte Probe aus unterschiedlichen Kristallen wie Si und SiGe, kann man aus der Kenntnis über das Verhältnis der Gitterkonstanten ($g_{SiGe} > g_{Si}$) auf das Vorzeichen der Beugungswelle schließen. Es gibt jedoch Halbleiterstrukturen, bei denen kein SiGe verwendet wird, so dass diese einfache Unterscheidungsmöglichkeit nicht existiert. Nun kann man aber die Testprobe aus Abbildung 5.24 als Referenz benutzen. Letztlich wird das Vorzeichen der Beugungswelle nur durch die Wahl der Kristallrichtungen vorgegeben. Tatsächlich verfügen Halbleiterstrukturen über eine klare Strukturierung entlang ganz bestimmter, technologisch relevanter Kristallrichtungen. So werden im Rahmen dieser Arbeit ausschließlich Transistorstrukturen auf Silizium-(001)-Wafers untersucht, bei denen die [001]-Richtung entlang der Wafernormalen zeigt. Abbildung 5.25a illustriert die Lage der technologisch relevanten Richtungen im einem (001)-Wafer. Die [001]-Richtung zeigt vom Substrat zum Transistorgate. Die Kontakte Source, Drain und Gate befinden sich entlang der [110]-Richtung. Die $[1\bar{1}0]$ -Richtung zeigt aus der durch die [110]- und [001]-Richtung aufgespannten Ebene heraus; die $[110]$ -Richtung entspricht der Durchstrahlungsrichtung des Kristalls mit Elektronen im TEM. In dieser Form spannen die Vektoren $e_x = [110]$, $e_y = [001]$ und $e_z = [1\bar{1}0]$ ein rechtshändiges Koordinatensystem auf. Die Wahl dieses Koordinatensystems erfolgt rein willkürlich, bietet in dieser Form jedoch den Vorteil, dass sowohl in den Phasenbildern als auch in den Deformationskarten die x -Achse nach rechts und der y -Achse nach oben zeigt. Die technologisch relevanten Richtungen entsprechen der [110]-Richtung, in welcher die Bewegung der Ladungsträger von Source zu Drain erfolgt sowie die dazu senkrechte [001]-Richtung. In dem Beispiel in Abbildung 5.24 wurde das Koordinatensystem exakt in dieser Form gewählt. Am *Tecnai F20* TEM tritt keine Rotation zwischen der Objekzebene und der hinteren Brennebene auf. Daher befindet sich der (004)-Beugungsreflex im Beugungsbild auf der Seite (oberhalb) vom Nullstrahl, wo sich in der Objekzebene die SiGe-Schicht bzw. Source und Drain befinden (Abbildung 5.25b). Der (220)-Beugungsreflex befindet sich im 90° Winkel dazu, rechts vom Nullstrahl. Dieses Koordinatensystem gilt als Referenz für alle dunkelfeldholographischen Aufnahmen in dieser Arbeit und legt somit das Vorzeichen der Beugungswelle eindeutig fest.

5.7 Numerische Ableitung der Phase und Rauschen

Um die Dehnung $\varepsilon_g(x, y)$ in Richtung des reziproken Gittervektors \mathbf{g}_{ref} zu erhalten, wird die rekonstruierte Phasenverteilung $\varphi_g(x, y)$ in die Richtung von \mathbf{g}_{ref} (Einheitsvektor: \mathbf{e}_g) abgeleitet:

$$\varepsilon_g(x, y) = -\frac{\nabla_g \varphi_g(x, y)}{2\pi|\mathbf{g}_{ref}|} \mathbf{e}_g. \quad (5.57)$$

Da die Phasenverteilung $\varphi_g(x, y)$ als Bildmatrix vorliegt, wird die Ableitung numerisch mittels Differenzenbildung bestimmt. Im folgenden werden drei mögliche Definitionen für die numerische Ableitung der Bildmatrix vorgestellt und die Auswirkungen auf Signalqualität und Auflösung diskutiert.

In *DigitalMicrograph* befindet sich wie in der numerischen Bildverarbeitung üblich der Ursprung der Bildmatrix in der oberen linken Ecke des Bildes. Der Index i zählt die Pixel in den Spalten von oben nach unten, der Index j die Pixel in den Reihen von links nach rechts. Der Betrachter am Bildschirm würde jedoch den Ursprung in die untere linke Ecke des Bildes legen, sowie die x -Richtung nach rechts und die y -Richtung nach oben definieren; d.h. der Index j zählt in positive x -Richtung und der Index i in negative y -Richtung. Ein Pixel $[i, j]$ der Bildmatrix besitzt den Wert $\varphi[i, j]$. Die Ableitung $D\varphi(x, y)$ kann durch Faltung des Bildes $\varphi(x, y)$ mit einer entsprechenden Filtermaske $d(x, y)$ berechnet werden:

$$D\varphi(x, y) = \varphi(x, y) \otimes d(x, y) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} d(x', y') \varphi(x - x', y - y') dx' dy'. \quad (5.58)$$

Für diskrete Funktionen wie Bildmatrizen wird dies zu:

$$D\varphi[i, j] = \varphi[i, j] \otimes d[i, j] = \sum_{k=-n}^n \sum_{l=-m}^m d[k, l] \varphi[i - k, j - l]. \quad (5.59)$$

Also entspricht die Faltung der Berechnung von gewichteten Summen der Pixel eines Bildes. Die Bildmatrix $d[i, j]$ wird als Filterkern bezeichnet. Damit kann der Wert der Ableitung $D\varphi[i, j]$ für jedes Pixel des Bildes berechnet werden, indem ein entsprechender Filterkern d auf das Pixel $[i, j]$ geschoben wird und die gewichtete Summe der Pixel in der Nachbarschaft von $[i, j]$ gebildet wird. Hierbei entsprechen die einzelnen Wichtungsfaktoren den Werten des Filterkerns. Für digitale Bilder können die Ableitungen durch einfache Differenzen zum benachbarten Pixel angenähert werden:

$$\begin{aligned} D_x &\cong d[i, j + 1] - d[i, j], \\ D_y &\cong d[i, j] - d[i + 1, j]. \end{aligned} \quad (5.60)$$

Diese Differenzen können durch einfache 2×1 - und 1×2 -Filterkerne ausgedrückt werden:

$$D_x = \begin{bmatrix} -1 & 1 \end{bmatrix}, \quad D_y = \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix}. \quad (5.61)$$

Bei dieser unsymmetrischen Definition der Ableitung sollte jedoch beachtet werden, dass die Position für die tatsächliche Annäherung von D_x an der Position $[i, j + 1/2]$ liegt und für D_y an $[i + 1/2, j]$.

Soll die Ableitung auf dem zentralen Pixel $[i, j]$ liegen, definiert man die Ableitungen mittels

der symmetrischen Differenzen:

$$\begin{aligned} D_x &\cong \frac{d[i, j+1] - d[i, j-1]}{2}, \\ D_y &\cong \frac{d[i-1, j] - d[i+1, j]}{2}, \end{aligned} \quad (5.62)$$

die sich durch 3×1 - und 1×3 -Filterkerne ausdrücken lassen:

$$D_x = \frac{1}{2} \times \begin{bmatrix} -1 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad D_y = \frac{1}{2} \times \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{bmatrix}. \quad (5.63)$$

In der numerischen Mathematik werden bei der Berechnung der Ableitung auf einem Grid aus diskreten Punkten auch noch weiterreichende Differenzenquotienten verwendet. Auf Grundlage der *Fünfpunkte-Mittelpunkt-Formel* für den Differenzenquotienten (ABRAMOWITZ und STEGUN 1964) können auch die übernächsten Pixel zur Näherung der Ableitungen einbezogen werden:

$$\begin{aligned} D_x &\cong \frac{d[i, j+2] - 8d[i, j+1] + 8d[i, j-1] - d[i, j-2]}{12}, \\ D_y &\cong \frac{d[i-2, j] - 8d[i-1, j] + 8d[i+1, j] - d[i+2, j]}{12}, \end{aligned} \quad (5.64)$$

mit den 5×1 - und 1×5 -Filterkernen:

$$D_x = \frac{1}{12} \times \begin{bmatrix} 1 & -8 & 0 & 8 & -1 \end{bmatrix}, \quad D_y = \frac{1}{12} \times \begin{bmatrix} 1 \\ -8 \\ 0 \\ 8 \\ -1 \end{bmatrix}. \quad (5.65)$$

Im folgenden soll nun das Rauschverhalten der drei Ableitungskernel untersucht werden. Das Rauschen in der rekonstruierten Phasenverteilung $\varphi(x, y)$ gehorcht einer Poisson-Statistik, d.h. ein Phasenpixel $\varphi[i, j]$ besitzt die Standardabweichung $\sigma_{\varphi[i, j]}$. Die Ableitung $D_x \varphi[i, j]$ ist eine Ausgangsgröße, die sich aus mehreren rauschbehafteten Phasenpixeln als Eingangsgrößen ergibt; z.B. ist die symmetrische Ableitung über 3 Pixel eine Funktion der Phasenpixel $\varphi[i, j+1]$ und $\varphi[i, j-1]$:

$$D_x^{(3)} \varphi[i, j] = \frac{1}{2} (\varphi[i, j+1] - \varphi[i, j-1]). \quad (5.66)$$

Die Standardabweichung σ_{D_x} der Ableitung berechnet sich mittels Gaußscher Fehlerfortpflanzung, indem die quadrierten Beiträge der einzelnen Standardabweichungen der Eingangsgrößen summiert werden. Hierbei ist angenommen, die Phasenpixel seien statistisch unabhängige Eingangsgrößen. So ergibt sich für die symmetrische Ableitung über 3 Pixel die Standardabweichung:

$$\begin{aligned} \sigma_{D_x^{(3)}} &= \sqrt{\left(\frac{\partial D_x \varphi[i, j]}{\partial \varphi[i, j+1]} \right)^2 \sigma_{\varphi[i, j+1]}^2 + \left(\frac{\partial D_x \varphi[i, j]}{\partial \varphi[i, j-1]} \right)^2 \sigma_{\varphi[i, j-1]}^2} \\ &= \frac{1}{2} \sqrt{\sigma_{\varphi[i, j+1]}^2 + \sigma_{\varphi[i, j-1]}^2}. \end{aligned} \quad (5.67)$$

Entsprechend erhält man für die unsymmetrische Ableitung über 2 Pixel die Standardabweichung:

$$\sigma_{D_x^{(2)}} = \sqrt{\sigma_{\varphi[i,j+1]}^2 + \sigma_{\varphi[i,j]}^2}, \quad (5.68)$$

und für die symmetrische Ableitung über 5 Pixel:

$$\sigma_{D_x^{(5)}} = \frac{1}{12} \sqrt{\sigma_{\varphi[i,j+2]}^2 + 64\sigma_{\varphi[i,j+1]}^2 + 64\sigma_{\varphi[i,j-1]}^2 + \sigma_{\varphi[i,j-2]}^2}. \quad (5.69)$$

Um die Standardabweichung $\sigma_{\varphi[i,j]}$ aus der Phasenverteilung $\varphi(x,y)$ abzuschätzen, wird ein Bereich (*region of interest*, ROI) in dem undeformierten Kristall definiert, in dem man den Mittelwert der Phase $\bar{\varphi}(x,y)$ und die Standardabweichung des Mittelwerts σ_{φ} bestimmt. Dann wird die Standardabweichung des Mittelwerts innerhalb der ROI als Näherung der Standardabweichung $\sigma_{\varphi[i,j]}$ für jedes Phasenpixel $\varphi[i,j]$ interpretiert, d.h. jedes Phasenpixel $\varphi[i,j]$ besitzt die gleiche Standardabweichung $\sigma_{\varphi[i,j]} = \sigma_{\varphi}$. Auf diese Weise erhält man für die Standardabweichungen der drei Ableitungsdefinitionen:

$$\sigma_{D_x^{(2)}} = 1,41 \sigma_{\varphi}, \quad \sigma_{D_x^{(3)}} = 0,71 \sigma_{\varphi}, \quad \sigma_{D_x^{(5)}} = 0,95 \sigma_{\varphi}. \quad (5.70)$$

Also verursacht der 2×1 -Ableitungskern ein doppelt so großes Rauschen in einem abgeleiteten Bild wie der 3×1 -Kern. Bei Verwendung des 5×1 -Ableitungskerns ist das Rauschen immer noch 1,3-fach größer. Dieses Rauschverhalten kann mit dem Testbild in Abbildung 5.26 überprüft werden. Dazu erzeugt man in *DigitalMicrograph* ein Bild, das einen Keil mit der Steigung 1 darstellt, auf das zusätzlich 10-faches Poisson-Rauschen addiert wird (Abb. 5.26a). Nun wird die Ableitung dieses Bildes für jeden der drei Filterkerne berechnet (Abbildungen 5.26a-c). Das Histogramm in Abbildung 5.26d zeigt die Häufigkeitsverteilung der Pixelwerte um den Mittelwert der Ableitung und die Standardabweichung. Man findet: $\sigma_{D_x^{(2)}} = 4,53$, $\sigma_{D_x^{(3)}} = 2,24$ und $\sigma_{D_x^{(5)}} = 3,00$. Exakt diese Werte erhält man auch, wenn die Standardabweichungen mit dem Poisson-Rauschen $\sigma_{\varphi} = \sqrt{10}$ in Gleichung (5.70) berechnet werden. Also eignet sich der 3×1 -Ableitungskern am besten zur Bestimmung der Ableitung aus der Phasenverteilung, denn er erhöht das Rauschen in geringerem Maße als alle anderen Ableitungskerne und bietet gleichzeitig eine gute laterale Auflösung, da die Ableitung über nur 3 Pixel bestimmt wird.

Abbildung 5.27 zeigt das Rauschverhalten an dem Beispiel der bereits bekannten SiGe-Schicht auf Si-Substrat. Aus dem $(00\bar{4})$ -DF-Hologramm (Abb. 5.27a) wird zunächst die Phase der $(00\bar{4})$ -Beugungswelle rekonstruiert (Abb. 5.27b). Sie besitzt ein Rauschen $\sigma_{\varphi} = 0,233$, das in der gekennzeichneten ROI bestimmt wurde. Die Dehnung in $[001]$ -Gitterrichtung ergibt sich aus der Faltung der Phasenverteilung mit dem entsprechenden Ableitungskernel D_y :

$$\varepsilon_{001}(x,y) = -\frac{1}{2\pi|g_{ref}|} \frac{1}{d_{pix}} \varphi_{00\bar{4}}(x,y) \otimes D_y. \quad (5.71)$$

Hierin bezeichnet $d_{pix} = 0,53 \text{ nm}$ die Pixelgröße bezogen auf die Objektebene. Der Abstand der $\{004\}$ -Netzebenen in Silizium beträgt $|g_{ref}| = 1/0,13577 \text{ nm}$. Die Standardabweichung der Dehnung σ_{ε} kann zunächst theoretisch aus der Standardabweichung für die Ableitung $\sigma_{D_y}^{(k)}$ ($k = 2,3,5$) berechnet werden:

$$\sigma_{\varepsilon} = \frac{1}{2\pi|g_{ref}|} \frac{1}{d_{pix}} \sigma_{D_y}^{(k)}. \quad (5.72)$$

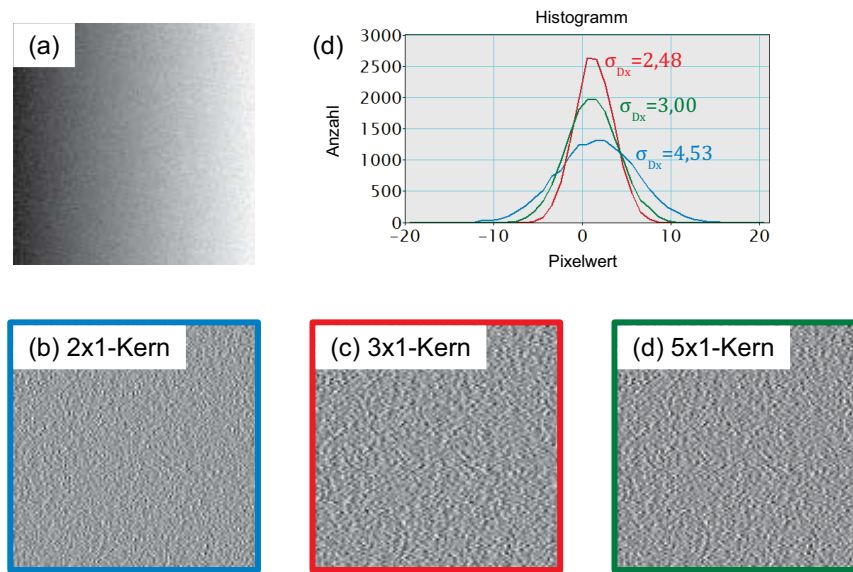


Abbildung 5.26: Rauschverhalten der Ableitung: a) Testbild: Keil mit Anstieg 1 und additivem 10-fachen Poisson-Rauschen. b)-c) Ableitungen durch Faltung des Testbildes mit 2×1 -, 3×1 - und 5×1 -Ableitungskern. d) Histogramm mit dem (Mittel)-Wert der Ableitung und zugehörige Standardabweichung.

		1×2 -Kern	1×3 -Kern	1×5 -Kern
σ_ε	theo.	0,0013	0,0007	0,0009
	exp.	0,0012	0,0007	0,0008

Tabelle 5.1: Rauschen σ_ε in den Deformationskarten aus Abbildung 5.27c. Theoretisches Rauschen: Zunächst wird das Rauschen der (004)-Phase in Abbildung 5.27b bestimmt, um daraus mit Fehlerrechnung σ_ε zu berechnen. Experimentelles Rauschen: Direkt gemessen in den Deformationskarten.

Dabei ergibt sich $\sigma_{D_y}^{(k)}$ nach Gleichung 5.70 aus dem Rauschen $\sigma_\varphi = 0,233$ der Phasenverteilung. Tabelle 5.1 listet die theoretisch berechneten und experimentell bestimmten Standardabweichungen σ_ε für die Dehnungskarten in Abbildung 5.27c auf. Das experimentelle Rauschen wird aus einer ROI bestimmt, die sich an gleicher Stelle befindet wie die ROI in der Phasenverteilung. Wie Tabelle 5.1 zeigt, wird das experimentelle Rauschverhalten durch die theoretische Rauschbetrachtung annähernd wiedergegeben. Die beobachteten Abweichungen werden durch die Korrelation der Pixel hervorgerufen; die Korrelation wird beim Aufnahmeprozess durch den Rauschtransfer der CCD-Kamera und bei der Rekonstruktion durch die Faltung der Beugungswelle mit der Ausschneidemaske hervorgerufen. Generell verschlechtert sich durch die Ableitung das Signal-Rausch-Verhältnis, wie der Vergleich der Linienprofile von Phase und Dehnung in Abbildung 5.27 zeigt.

5.8 Kalibrierung von Phasen- und Deformationskarte

Bisher wurden ausschließlich die statistischen Fehler in der Deformationskarte berücksichtigt. Aber es existiert auch eine systematische Fehlerquelle. In Gleichung (5.71) wird die Ableitung mit der auf die Objektebene bezogenen Pixelbreite d_{pix} skaliert. Dies stellt sicher, dass man bei

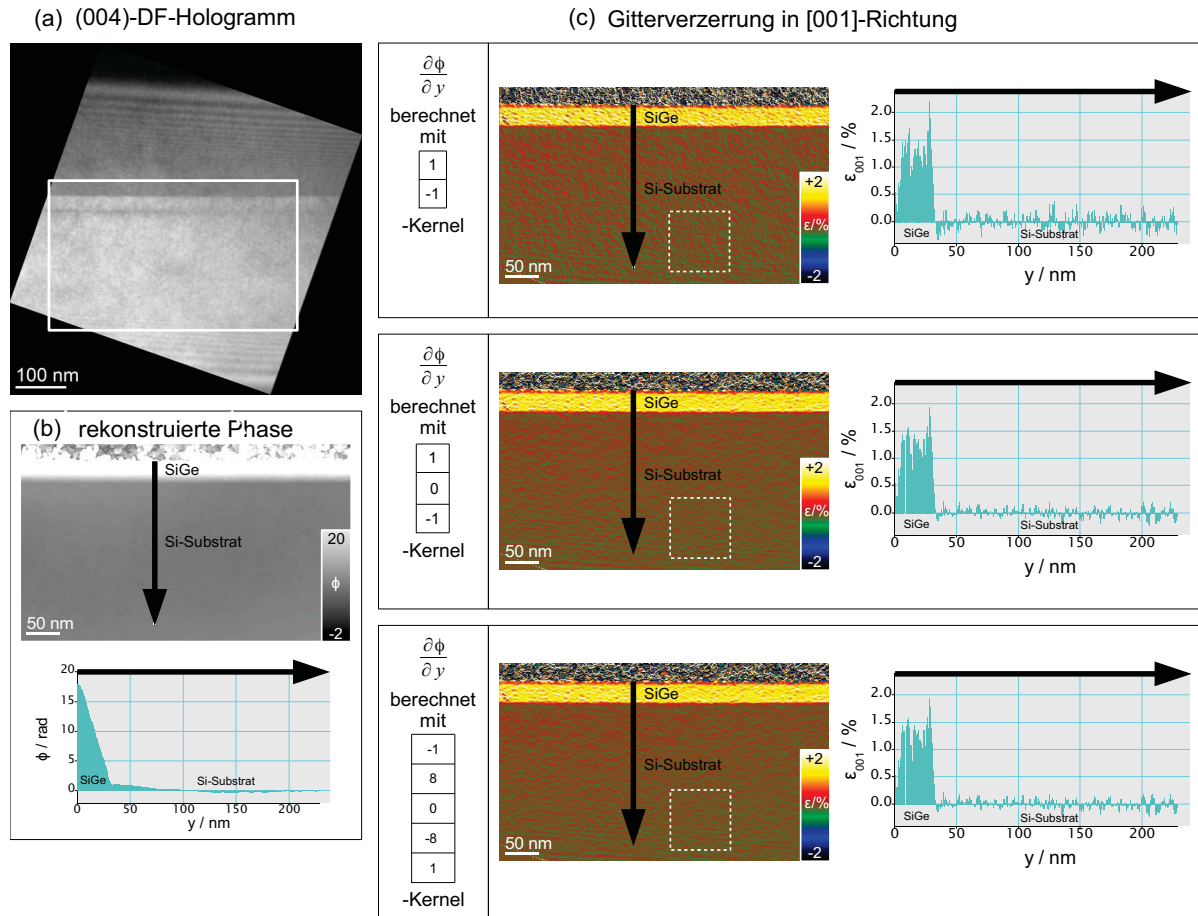


Abbildung 5.27: Vergleich verschiedener Ableitungskerne. a) (004)-DF-Hologramm einer SiGe-Schicht auf Si-Substrat. b) Rekonstruierte (004)-Phase mit steilem Gradienten im SiGe. c) [001]-Gitterverzerrung abgeleitet aus b) mit 2×1 -, 3×1 - und 5×1 -Ableitungskern. Mit dem 3×1 -Ableitungskern resultiert das geringste Rauschen. Die weißen Rechtecke kennzeichnen die Bereiche in denen das Rauschen bestimmt wird.

Multiplikation mit $1/(2\pi|g_{ref}|)$ die Dehnung als dimensionslose Größe erhält. Da der Betrag des reziproken Gittervektors $|g_{ref}|$ aus einem DF-Hologramm nicht bestimmt werden kann, wird er aus dem Literaturwert der Gitterkonstante für Silizium $a_{Si} = 0,3571 \text{ nm}$ berechnet. Die auf das Objekt bezogene Pixelgröße

$$d_{pix} = \frac{d_{CCD}}{M_{ges}} \quad (5.73)$$

bestimmt sich aus der Größe der CCD-Pixel d_{CCD} und der Gesamtvergrößerung des Mikroskops M_{ges} . Also setzt dies eine korrekte Vergrößerungskalibrierung für das Mikroskop voraus. Denn in Gleichung (5.71) überträgt sich der relative Fehler $\Delta d_{pix}/d_{pix}$ direkt auf den relativen Fehler in der Dehnung $\Delta\epsilon/\epsilon$. Für das Beispiel mit der SiGe-Schicht bedeutet dies, ein relativer Fehler $\Delta d_{pix}/d_{pix} = 10\%$ würde zu einem gleich großen relativen Fehler in der Dehnungsmessung führen; der absolute Fehler betrüge $\Delta\epsilon \approx 0,001$, wenn der tatsächliche Wert der Dehnung in der SiGe-Schicht $\epsilon \approx 0,013$ ist. Damit würde der systematische Fehler durch die Vergrößerungskalibrierung $\Delta\epsilon = \mathcal{O}(10^{-3})$ eine Größenordnung oberhalb des Rauschens $\sigma_\epsilon = \mathcal{O}(10^{-4})$ liegen. Da Halbleiterstrukturen im allgemeinen ganz bestimmte Strukturmerkmale mit bekannten Abständen aufweisen, können diese zur Kalibrierung

des Dunkelfeldhologramms herangezogen werden. Dazu bietet es sich an, an der selben Objektstelle und unter der gleichen Vergrößerung wie bei der Aufnahme des DF-Hologramms eine Hellfeld-TEM-Aufnahme zu Kalibrierungszwecken aufzuzeichnen. Außerdem wurde am *Tecnai F20* TEM die Vergrößerung für die verwendeten Holographiestrahlangänge anhand eines Katalasekristalls kalibriert.

5.9 Glättung der Dehnungskarte

Der vorige Abschnitt hat gezeigt, dass die Ableitung der rekonstruierten Phase zwangsläufig zu einer Erhöhung des Rauschens in der Deformationskarte führt. Bei einem hohen Rauschpegel kann dies die Interpretation des Deformationsverlaufs erschweren. Daher ist es wünschenswert, das Rauschen in der Deformationskarte so gering wie möglich zu halten. Naheliegender wäre, die Qualität des Phasensignals zu verbessern, was durch Aufnahme und Rekonstruktion einer Hologrammserie erreicht werden kann. Dies soll jedoch erst im nächsten Abschnitt erläutert werden. Dagegen kann man für ein einzelnes Hologramm überlegen, die Phasenverteilung vor der Ableitung der Deformationskarte zu glätten. Dazu wird die Phasenverteilung $\varphi_g(x, y)$ mit einem geeigneten Glättungsfilter $s(x, y)$ gefaltet:

$$\tilde{\varphi}_g(x, y) = \varphi_g(x, y) \otimes s(x, y) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} s(x', y') \varphi(x - x', y - y') dx' dy'. \quad (5.74)$$

Die Interpolation mit dem Glättungsfilter führt zwar zu einer Reduktion des Rauschens, bedeutet aber auch immer einen Verlust an Auflösung.

Im vorigen Abschnitt wurde die Deformationskarte aus der Ableitung der Phase zwischen jeweils benachbarten CCD-Pixeln berechnet. Als Maß für die Lateralauflösung in der off-axis Elektronenholographie dient jedoch der Durchmesser (oder im Fall quadratischer Pixel die Breite) des rekonstruierten Pixels. Dabei bestimmt sich der Durchmesser des rekonstruierten Pixels aus dem Radius der Rekonstruktionsmaske beim Ausschneiden des Seitenbandes aus der Fouriertransformierten der Hologrammintensität. Zusätzlich wird bei der Rekonstruktion die Phaseninformation in jedem CCD-Pixel über benachbarte Pixel verschmiert, weil jedes CCD-Pixel mit der Maskenfunktion gefaltet wird. Der Bereich der Verschmierung um jedes CCD-Pixel ist dabei durch den Durchmesser des rekonstruierten Pixels gegeben. Also ist die laterale Information über die Phasen- bzw. Deformationsverteilung tatsächlich durch die rekonstruierten Pixel und nicht durch die CCD-Pixel gegeben. Daher ist es sinnvoll, die Größe des Glättungsfilters an die Lateralauflösung, also die Größe eines rekonstruierten Pixels, anzupassen. Nach Glättung der Phase erfolgt die Ableitung der Phase wie gewohnt mit der symmetrischen Ableitungsformel zwischen benachbarten CCD-Pixeln.

Alternativ lässt sich ein Glättungseffekt auch durch *Binning* der Phasenverteilung erzielen. *Binning* bezeichnet das Zusammenfassen benachbarter CCD-Pixel. Dazu ist es sinnvoll, CCD-Pixel so zusammenzufassen, dass das gebinnte Pixel die Breite eines rekonstruierten Pixels besitzt. So ergibt sich der Wert des gebinnten Pixels dadurch, dass über die zusammengefassten CCD-Pixel gemittelt wird. Indem man nun die Ableitung zwischen den gebinnten Pixeln ausführt, erhält man automatisch eine Glättung der abgeleiteten Deformationskarte. Natürlich verliert man auch bei dieser Methode an Auflösung.

Abbildung 5.28 diskutiert beide Methoden an dem bekannten Beispiel der SiGe-Schicht auf Si-Substrat. Aus einem (004)-DF-Hologramm wird zunächst die Phasenverteilung der (004)-Beugungswelle mit einer Lateralauflösung $d_{res} = 4,3 \text{ nm}$ rekonstruiert (Abbildung 5.28a). Die kalibrierte Pixelgröße bezogen auf die Objektebene beträgt

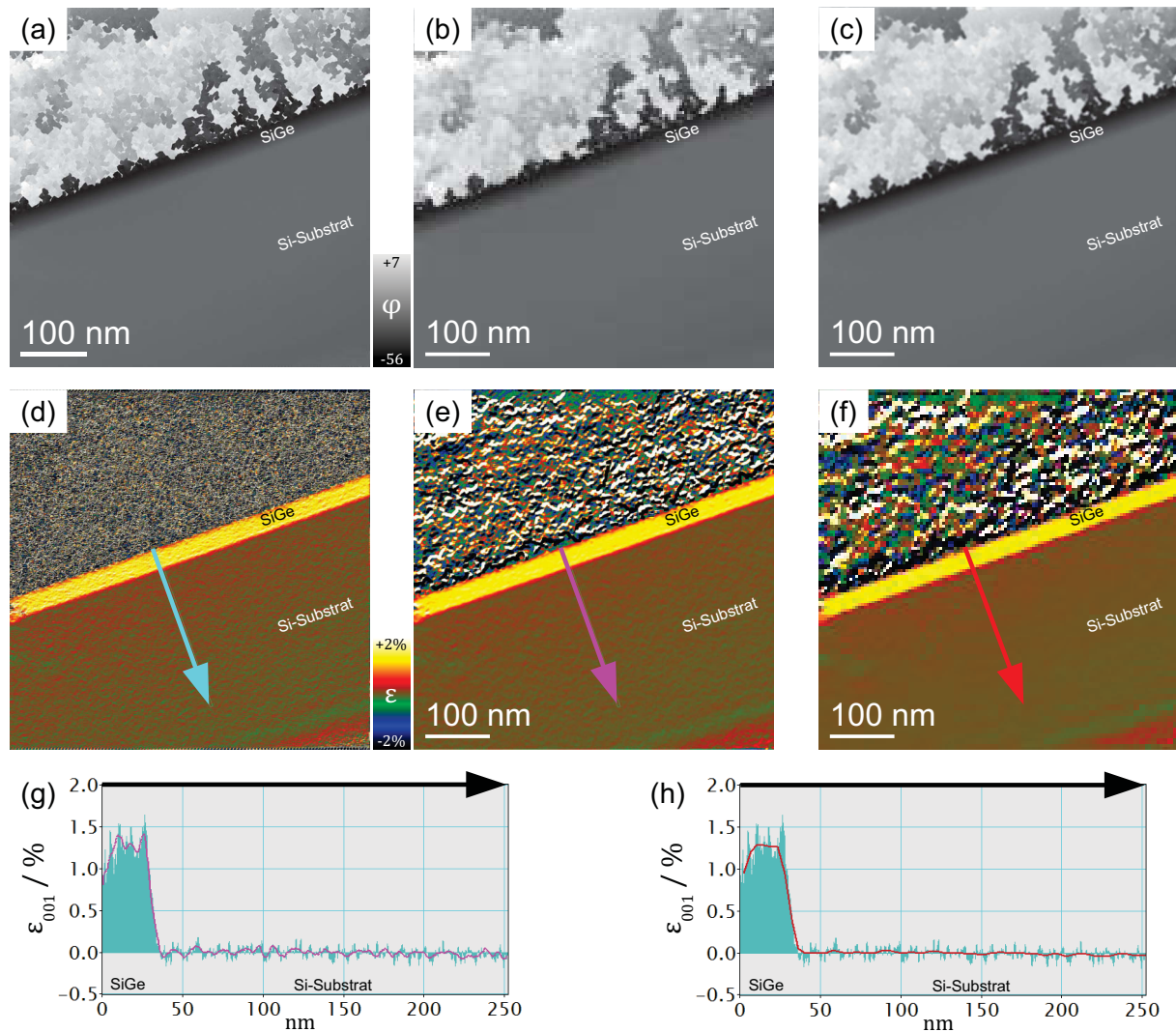


Abbildung 5.28: Glättung der Deformationskarte: a) Rekonstruierte Phase der (004)-Beugungswelle. Kalibrierung: $d_{pix} = 0,27$ nm. Auflösung: $1/q_{res} = 4,3$ nm, d.h. 1 rek. Pixel entspricht 16 CCD-Pixeln. b) Geglättete Phase nach Anwendung von 16×16 -Pixel großem, hartem Glättungsfilter. c) Achtfach gebinnete Phase. Kalibrierung: $d_{pix} = 4,26$ nm. d) [001]-Deformationskarte aus a). e) [001]-Deformationskarte aus b). f) [001]-Deformationskarte aus c). g) Vergleich der Profile aus d) und e). h) Vergleich der Profile aus d) und f).

$d_{pix} = 0,27$ nm, so dass ein rekonstruiertes Pixel 16×16 CCD-Pixeln entspricht. Die rekonstruierte Phase 5.28a wird in *DigitalMicrograph* mit einem harten Glättungsfilter bestehend aus einem 16×16 -Kernel gefaltet (Abbildung 5.28b). Durch Vergleiche zwischen verschiedenen starken Gaussfiltern und einem harten Mittlungsfilter (alle Einträge = 1) hat sich herausgestellt, dass das harte Mittlungsfilter das Rauschen am effektivsten dämpft. Alternativ dazu wird die rekonstruierte Phase 5.28a in *DigitalMicrograph* 16-fach gebinnt, wobei sich die Größe des Phasenbildes von ursprünglich 2048×2048 auf nun 128×128 Pixel reduziert. Dadurch verringert sich die Pixelgröße auf $d_{pix} = 4,26$ nm und entspricht in etwa der tatsächlichen Lateralauflösung (Abbildung 5.28c). Abbildungen 5.28d, e, f zeigen die Deformationskarten, abgeleitet aus originalem, geglättetem und gebinntem Phasenbild. Ein Vergleich der Linienprofile in Abbildung 5.28g und 5.28h veranschaulicht, wie das Rauschen sowohl durch Anwendung eines Glättungsfilters als auch durch Binnens der Phase reduziert werden konnte, während feine Details verloren gehen. In jeder Deformationskarte wird das

Rauschen an identischer Stelle durch Mittlung über einen ca. 136 nm großen Bereich bestimmt. Ohne Glättung beträgt das Rauschen in der Deformationskarte $\sigma_\epsilon = 0,1\%$, bei Anwendung des harten Glättungsfilters $\sigma_\epsilon = 0,03\%$ und bei Binnen $\sigma_\epsilon = 0,02\%$. Also bietet Binnen der Phase gegenüber der Anwendung eines harten Glättungsfilters nur geringe Vorteile hinsichtlich der Rauschreduktion. Vergleicht man allerdings das Signal in der SiGe-Schicht, so stellt man fest, dass durch Binnen die in den anderen Abbildungen sichtbaren Variationen des Deformationssignals in der SiGe-Schicht komplett verschwinden. Da man sich nicht sicher sein kann, ob es sich bei diesen lokalen Schwankungen um reale Information über den Deformationszustand oder um Rauschen handelt, besteht die Gefahr, dass man durch Binnen Information verliert oder verfälscht. Die Anwendung des Glättungsfilters dagegen zerstört diese Information nicht, da er diese Details weniger stark dämpft.

5.10 Aufzeichnung und Rekonstruktion einer Dunkelfeldhologrammserie

Die Signalqualität in der abgeleiteten Deformationskarte hängt unmittelbar von der Signalqualität in der rekonstruierten Phasenverteilung der Beugungswelle ab. Starkes Rauschen in der rekonstruierten Phase verschlechtert aufgrund der Ableitung das Signal-Rausch-Verhältnis in der Deformationskarte.

Da zur Aufzeichnung eines Hologramms nur eine begrenzte Anzahl an Elektronen zur Verfügung steht, ist die Intensität des aufgezeichneten Hologramms prinzipiell verrauscht, wobei das Rauschen einer Poisson-Statistik gehorcht. Die Standardabweichung in einem rekonstruierten Phasenpixel lautet nach modellbasierter Rechnung von LENZ (1988) für einen idealen Detektor ohne Korrelationen:

$$\sigma_\varphi = \sqrt{\frac{2}{\mu^2 N_{rec}}}. \quad (5.75)$$

Hierin bezeichnet μ den Interferenzstreifenkontrast inklusive der ortsabhängigen Amplitudenmodulation der Welle und N_{rec} ist die Anzahl der Elektronen in dem rekonstruierten Pixel. Eine bewährte Möglichkeit, die Standardabweichung zu verringern, besteht darin, die Belichtungszeit und damit N_{rec} zu erhöhen. Da N_{rec} mit der Wurzel eingeht, benötigt man allerdings sehr lange Belichtungszeiten, um eine spürbare Verbesserung der Signalqualität zu erzielen. Gleichzeitig besteht aber die Gefahr, dass mit längerer Belichtungszeit der Interferenzstreifenkontrast μ aufgrund mechanischer Instabilitäten abnimmt. Daher existiert eine optimale Belichtungszeit t_{exp} , bei der σ_φ minimal ist.

Eine weitere Möglichkeit, die Signalqualität in der rekonstruierten Phase zu erhöhen, stellt die Aufnahme einer DFH-Serie dar. Sie erlaubt, die Rekonstruktion einer gemittelten Beugungswelle $\bar{\psi}_g$ mit mittlerer Amplitude \bar{a}_g und Phase $\bar{\varphi}_g$ gemäß dem von RÖDER (2013) vorgestellten Mittlungsverfahren. Dabei basiert das Mittlungsverfahren der Welle auf einer Mittlung von Real- und Imaginärteil, wodurch die Methode äquivalent zu dem eigentlichen holographischen Aufzeichnungsprozess ist, bei dem die Welle über die Aufnahmezeit integriert wird (LUBK 2010). Somit entspricht diese Methode direkt einer virtuellen Verlängerung der Belichtungszeit. Des weiteren erlaubt das Verfahren, jedes Pixel in der rekonstruierten Phase statistisch auszuwerten, und mit Hilfe einer statistischen Fehlerbetrachtung das Rauschen in jedem Pixel der rekonstruierten Deformationskarte aus

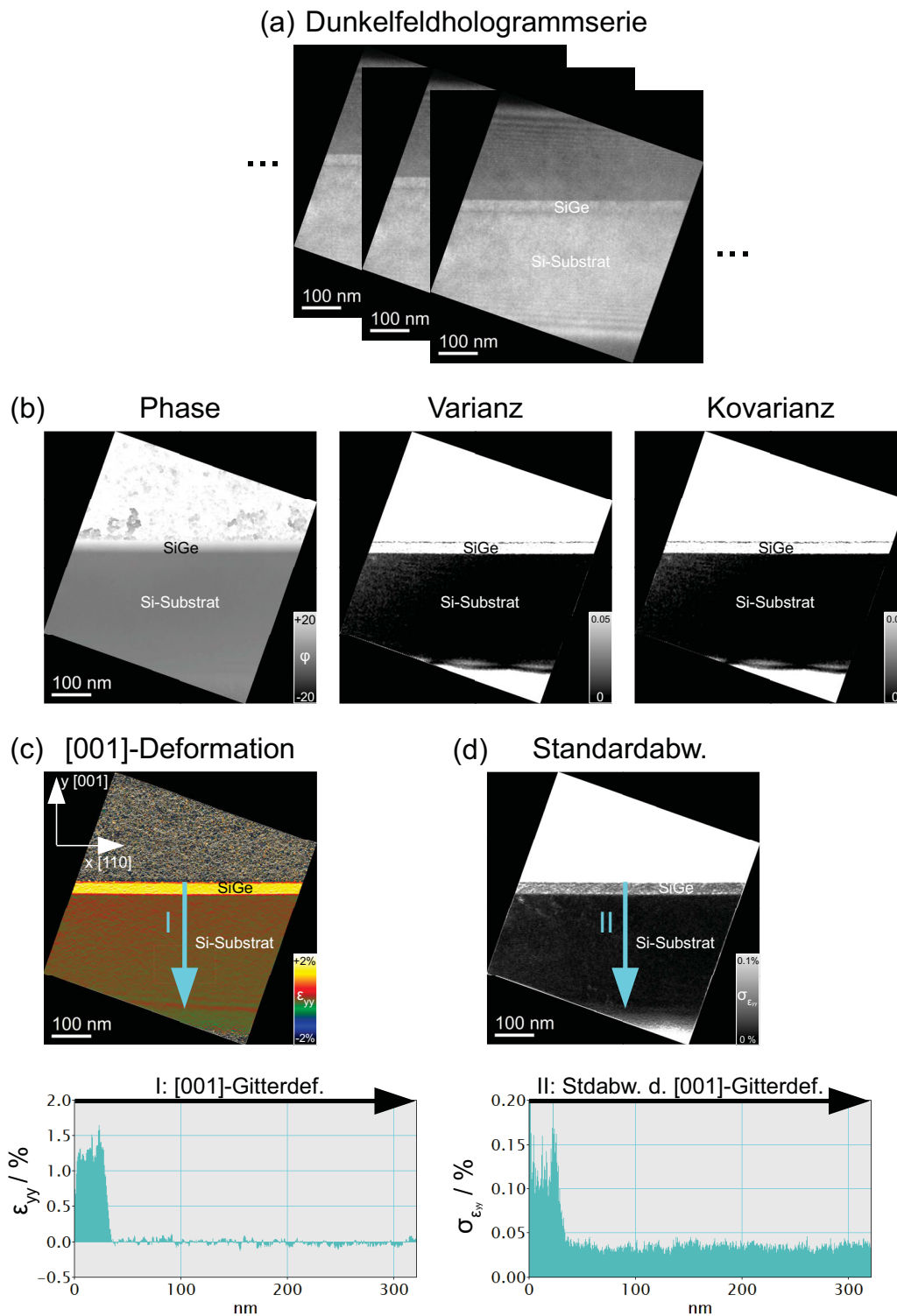


Abbildung 5.29: Aufzeichnung und Rekonstruktion einer (004)-DFH-Serie an einer SiGe-Schicht auf Si-Substrat. a) Die Hologrammserie angedeutet durch drei (004)-DF-Hologramme, erlaubt die Rekonstruktion von b) mittlerer Phase, Varianz der Phasenpixel ϕ_i , sowie Kovarianz zw. den Phasenpixeln ϕ_{i-1} und ϕ_{i+1} . c) [001]-Gitterdeformation ε_{yy} abgeleitet aus der mittleren Phase mit Linienprofil I vom SiGe ins Si. d) Standardabweichung $\sigma_{\varepsilon_{yy}}$ durch Fehlerfortpflanzung aus der Varianz und der Kovarianz der Phasenpixel mit Linienprofil II an identischer Stelle wie I. Das Rauschen der [001]-Gitterdeformation in der SiGe-Schicht beträgt $\sigma_{\varepsilon_{yy}} \approx 0,10\%$.

dem Rauschen der Pixel in der Phasenverteilung zu bestimmen. Dies ermöglicht, auch Korrelationen zwischen den Pixeln bei der Fehlerbetrachtung zu berücksichtigen.

Abbildung 5.29 erläutert Aufnahme und Rekonstruktion am Beispiel einer (004)-Dunkelfeld-hologrammserie einer SiGe-Schicht auf Si-Substrat. Zunächst wird eine Serie von $N = 15$ DF-Hologrammen unter identischen Bedingungen an der selben Objektstelle aufgezeichnet. Die Belichtungszeit pro DF-Hologramm beträgt $t_{exp} = 4$ s. Abbildung 5.29a zeigt beispielhaft drei Hologramme der Serie. Dabei gilt es, systematische Fehler bei der Aufnahme der Hologrammserie zu vermeiden, da sie die statistischen Fehler der Messung überlagern würden. Dazu zählen in erster Linie Drift von Objekt- und Biprismaposition. Dies lässt sich erreichen, indem nach der Orientierung von Probe und Biprisma, sowie der Justierung der Beleuchtung ca. 15–30 Minuten gewartet wird, um Objekt und Biprismahalter ausdriften zu lassen. Kleinere Abweichungen in der Objektposition lassen sich nachträglich bei der Rekonstruktion mit einem *DigitalMicrograph*-Skript subpixelgenau korrigieren. Zusätzlich zur DFH-Serie wird eine Leerhologrammserie aufgezeichnet, um bei der Rekonstruktion die Verzeichnungen in jedem DF-Hologramm der Serie mit einem entsprechenden Leerhologramm korrigieren zu können. Vor der Rekonstruktion werden beide Hologrammserien gemäß der in Abschnitt 5.4 vorgestellten Methoden aufbereitet, d.h. fehlerhafte Detektorpixel werden korrigiert und die Fresnelsäume gefiltert. Hingegen wird auf eine Filterung der Hologrammintensitäten mittels Wiener-Filter verzichtet, da die Reduzierung des Rauschens bereits durch Serienaufnahme als virtuelle Verlängerung der Aufnahmezeit erzielt wird. Die eigentliche Rekonstruktion erfolgt schrittweise für jedes DF-Hologramm der Serie, so dass am Ende eine Serie aus N rekonstruierten Amplituden und Phasen vorliegt. In den Phasenbildern werden zunächst die zufälligen Phasenoffsets korrigiert, indem die Phasenwerte im Si-Substrat, wo die Phase konstant ist, in jedem Hologramm auf den gleichen Wert gesetzt werden; dies ändert nichts an den Phasendifferenzen und -gradienten im Bild. Anschließend kann mit einem Skript in *Matlab* oder *DigitalMicrograph* aus Amplituden- und Phasenserie eine gemittelte Welle mit gemittelter Amplitude und Phase berechnet werden (RÖDER 2013). Die gemittelte Phase $\bar{\varphi}_g$ der (004)-Beugungswelle ist in Abbildung 5.29b dargestellt. Das Mittelungsverfahren liefert neben der gemittelten Phase auch die Varianz $\sigma_{\bar{\varphi}}$ der Phase in jedem Phasenpixel, die als Maß für das Rauschen der gemittelten Phase angesehen werden kann.

Die Deformationskarte $\varepsilon_{yy}(x, y)$ der [001]-Gitterdeformation wird durch Ableiten der gemittelten Phase $\bar{\varphi}_g(x, y)$ in y -Richtung berechnet. Dazu wird die in Abschnitt 5.7 definierte symmetrische Ableitung über 3 Pixel benutzt, d.h. die Ableitung ergibt sich aus der Faltung der gemittelten Phase mit dem 1×3 -Ableitungskern $D_y^{(3)}$:

$$\varepsilon_{yy}(x, y) = -\frac{1}{2\pi|g_{ref}|} \frac{1}{d_{pix}} \varphi_{00\bar{4}}(x, y) \otimes D_y^{(3)}. \quad (5.76)$$

Die Ableitung in dem Pixel $\bar{\varphi}[i, j]$ (vgl. Abschnitt 5.7: i zählt in negativer y -Richtung) wird dabei aus der Differenz der benachbarten Pixel $\varphi[i + 1, j]$ und $\varphi[i - 1, j]$ berechnet:

$$\varphi_{00\bar{4}}(x, y) \otimes D_y^{(3)} = \frac{1}{2} (\bar{\varphi}[i + 1, j] - \bar{\varphi}[i - 1, j]). \quad (5.77)$$

Mittels Fehlerfortpflanzung kann daraus die Standardabweichung $\sigma_{\varepsilon_{yy}}$ der

Deformationsmessung in jedem Pixel $[i, j]$ abgeleitet werden:

$$\sigma_{\varepsilon_{yy}}[i, j] = -\frac{1}{2\pi|g_{ref}|} \frac{1}{d_{pix}} \frac{1}{2} \sqrt{\sigma_{\bar{\varphi}[i+1, j]}^2 + \sigma_{\bar{\varphi}[i-1, j]}^2 - 2\text{Cov}(\bar{\varphi}[i+1, j], \bar{\varphi}[i-1, j])}. \quad (5.78)$$

Anders als noch in Abschnitt 5.7 wird zusätzlich zu den Varianzen der Phasenpixel $\sigma_{\bar{\varphi}[i+1, j]}^2$ und $\sigma_{\bar{\varphi}[i-1, j]}^2$ auch die Kovarianz $\text{Cov}(\bar{\varphi}[i+1, j], \bar{\varphi}[i-1, j])$, d.h. die Korrelation zwischen den Phasenpixeln, berücksichtigt. Die Kovarianz kann dabei aus der gemittelten Phase $\bar{\varphi}$ und den einzelnen Phasen φ_k der Serie bestimmt werden:

$$\begin{aligned} \text{Cov}(\bar{\varphi}[i+1, j], \bar{\varphi}[i-1, j]) = \\ \frac{1}{N-1} \sum_{k=1}^N (\bar{\varphi}[i+1, j] - \varphi_k[i+1, j])^2 \cdot (\bar{\varphi}[i-1, j] - \varphi_k[i-1, j])^2. \end{aligned} \quad (5.79)$$

Wie Abbildung 5.29b zeigt, ist die Kovarianz positiv. Da in Gleichung (5.78) die Kovarianz von den Varianzen abgezogen wird, verringert sich die Standardabweichung der Deformationsmessung im Vergleich zur Fehlerrechnung mit unkorrelierten Pixeln. Dies kann wie folgt interpretiert werden: Wenn ein Pixel $\varphi[i, j]$ vom Mittelwert $\bar{\varphi}[i, j]$ abweicht, sorgt die Korrelation zwischen den Pixeln dafür, dass auch die benachbarten Pixel $\varphi[i+1, j]$ und $\varphi[i-1, j]$ in gleicher Weise von ihren jeweiligen Mittelwerten abweichen, d.h. etwa gleich stark und mit gleichem Vorzeichen. Dadurch ändert sich jedoch die Differenz bzw. die Ableitung zwischen den Pixeln kaum; die Varianzen dieser Pixel tragen daher kaum zu Abweichungen in der Ableitung bei.

Abbildung 5.29c zeigt die Deformationskarte $\varepsilon_{yy}(x, y)$, die aus der gemittelten Phase $\bar{\varphi}_g(x, y)$ abgeleitet wurde. Daneben ist in Abbildung 5.29d die Standardabweichung der Deformationsmessung $\sigma_{\varepsilon_{yy}}(x, y)$ abgebildet. Ein über die Breite eines rekonstruierten Pixels (16 CCD-Pixel) gemitteltes Linienprofil in Abbildung 5.29c zeigt den Verlauf der [001]-Gitterdeformation von der SiGe-Schicht in das Si-Substrat. Aus dem Linienprofil an identischem Ort und mit identischer Breite in Abbildung 5.29d kann die Standardabweichung als Maß für die statistische Messabweichung der Deformationsmessung abgelesen werden. Damit bestimmt sich die [001]-Gitterverspannung in der SiGe-Schicht zu $\varepsilon_{yy}(x, y) = (1,2 \pm 0,1) \%$. Im Si-Substrat beträgt $\sigma_{\varepsilon_{yy}}(x, y) = 0,03 \%$. Dagegen erhält man bei räumlicher Mittlung benachbarter Pixel im Si-Substrat $\sigma_{\varepsilon_{yy}} = 0,05 \%$. Somit führt die Bestimmung der Standardabweichung durch räumliche Mittlung zu einer Überabschätzung des Rauschens. Jedoch ist die Größenordnung der ermittelten Rauschwerte vergleichbar.

Abbildung 5.30 illustriert den Vorteil der Hologrammserien- gegenüber der Einzelhologrammrekonstruktion hinsichtlich der Signalauflösung. Zunächst wird in Abbildung 5.30a die Deformationskarte aus einem einzelnen (004)-DF-Hologramm rekonstruiert. Die Objektstelle ist identisch zu der Hologrammserienaufnahme. Die Belichtungszeit beträgt typischerweise $t_{exp} = 8 \text{ s}$. Abbildung 5.30b zeigt die Deformationskarte, die aus der Serie von (004)-DF-Hologrammen rekonstruiert wurde. In beiden Deformationskarten werden identische Linienprofile vom SiGe ins Si untersucht. Der Rauschlevel wird durch räumliche Mittlung im Si-Substrat bestimmt, um ihn an einem einheitlichen Kriterium vergleichen zu können. Das Rauschen beträgt bei der Einzelmessung $\sigma_{\varepsilon_{yy}} = 0,12 \%$, in der gemittelten Deformationskarte nur $\sigma_{\varepsilon_{yy}} = 0,05 \%$, also etwa die Hälfte.

Um die Vorteile der Serienaufnahme deutlicher herauszustellen, werden an der bekannten Probe unter sonst gleichen Bedingungen Einzelhologramme mit zunehmender Belichtungszeit

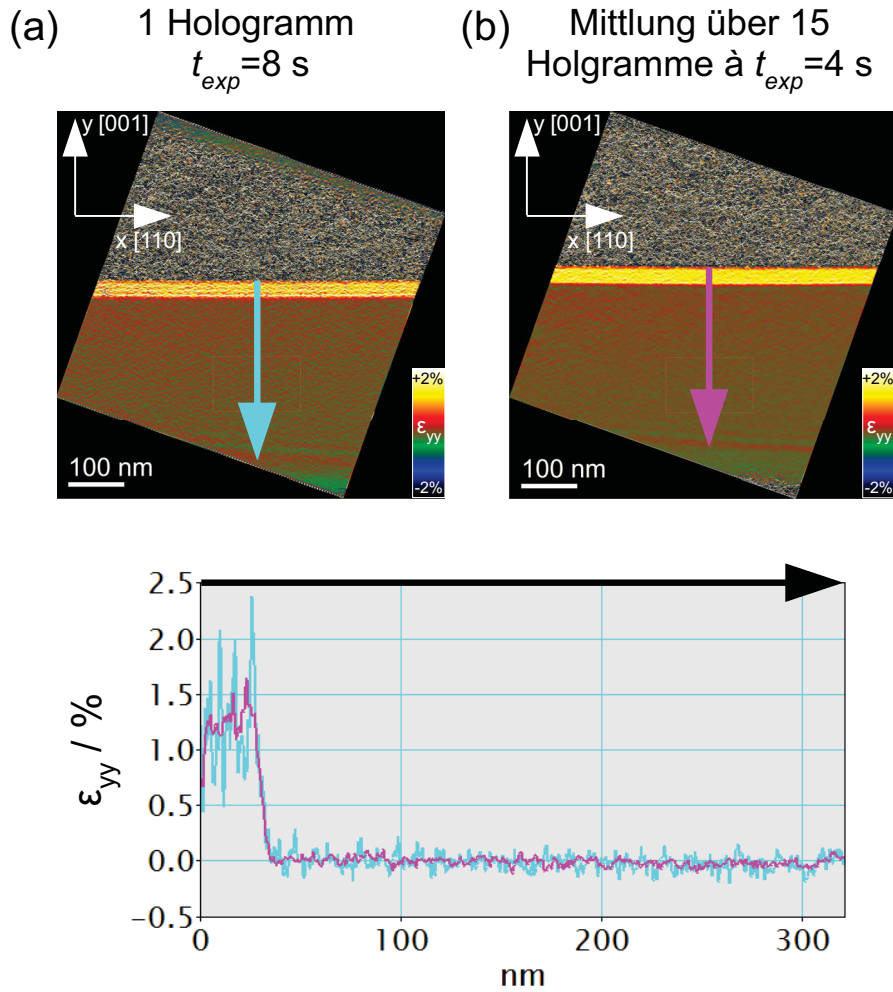


Abbildung 5.30: Vergleich von Einzelhologramm- und Hologrammserienrekonstruktion: a) Deformationskarte rekonstruiert aus einem (004)-DF-Hologramm mit $t_{exp} = 8$ s Belichtungszeit. b) Deformationskarte rekonstruiert aus Hologrammserie von $N = 15$ (004)-DF-Hologramm mit je $t_{exp} = 4$ s Belichtungszeit; das Rauschen im Si-Substrat ist etwa nur halb so groß.

aufgezeichnet und rekonstruiert. Aus den Hologrammen werden Streifenkontrast μ und die pro CCD-Pixel rekonstruierten Elektronen N_{CCD} bestimmt. Aufgrund der verwendeten Rekonstruktionsmaske beträgt die Breite eines rekonstruierten Pixels 16 CCD-Pixel, so dass $N = 16^2 N_{CCD}$ Elektronen pro rekonstruiertem Pixel detektiert werden. Mit Hilfe von Gleichung 5.75 kann daraus zunächst das theoretische Phasenrauschen σ_{φ}^{theo} und anschließend über Gleichung 5.1 in Abschnitt 5.7 die zu erwartende Standardabweichung in der Deformationskarte $\sigma_{\varepsilon_{yy}}^{theo}$ abgeschätzt werden. Außerdem wird die Standardabweichung $\sigma_{\varepsilon_{yy}}^{exp}$ experimentell, durch räumliche Mittlung in den gekennzeichneten Bereichen im Si-Substrat, so wie in 5.30a, bestimmt. Tabelle 5.2 fasst die Ergebnisse zusammen. In den Einzelhologrammen lässt sich bei Verlängerung der Belichtungszeit zunächst eine Verringerung des Rauschens in der Deformationmessung beobachten. Die Standardabweichung σ_{φ} verhält sich laut Gleichung 5.75 umgekehrt proportional zu μ und \sqrt{N} ; $\sigma_{\varepsilon_{yy}}$ wiederum ist proportional zu σ_{φ} . Bei längerer Belichtungszeit nimmt N zu, während μ annähernd konstant bleibt. Also verbessert sich $\sigma_{\varepsilon_{yy}}$. Ab einer Belichtungszeit $t_{exp} \geq 12$ s kann das Rauschen auf $\sigma_{\varepsilon_{yy}} = 0,09\%$ halbiert werden gegenüber $\sigma_{\varepsilon_{yy}} = 0,19\%$ bei $t_{exp} \geq 4$ s.

t_{exp}/s	$\mu/\%$	N_{CCD}	N	$\sigma_{\varphi}^{theo}/rad$	$\sigma_{\varepsilon_{yy}}^{theo}/\%$	$\sigma_{\varepsilon_{yy}}^{exp}/\%$
4	12,8	453	115968	0,0324	0,19	0,14
8	11,6	888	227328	0,0256	0,15	0,12
12	13,3	1299	332544	0,0184	0,11	0,09
16	11,0	1653	423168	0,0198	0,11	0,10
20	11,9	2065	528640	0,0164	0,09	0,09
Serie						0,05

Tabelle 5.2: Rauschverhalten in DF-Hologrammen mit zunehmender Belichtungszeit.

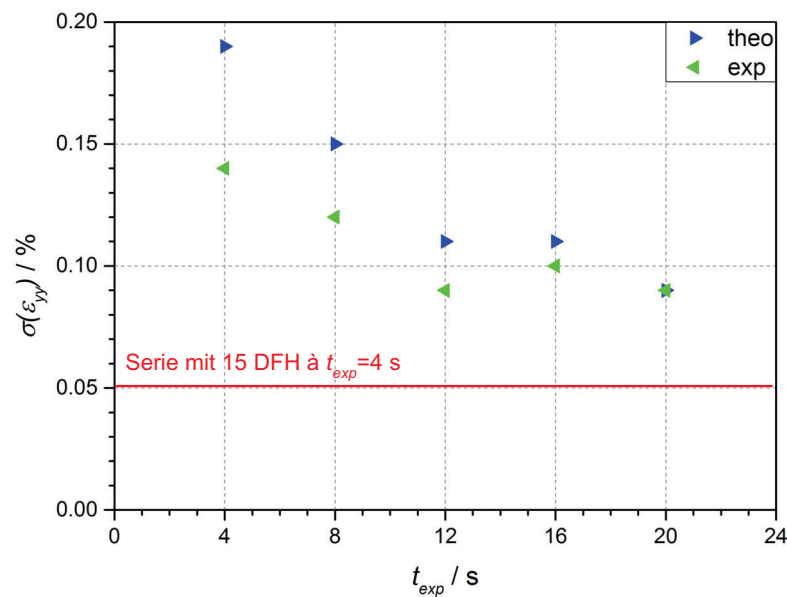


Abbildung 5.31: Standardabweichung $\sigma_{\varepsilon_{yy}}$ in Deformationskarten aus Einzelrekonstruktion in Abhängigkeit von der Belichtungszeit t_{exp} und Vergleich mit Serienrekonstruktion.

Allerdings erreicht ab $t_{exp} \geq 12s$ die Standardabweichung ein Plateau, da bei längerer Belichtungszeit der Streifenkontrast durch mechanische Instabilitäten abnimmt. Selbst bei einer Belichtungszeit $t_{exp} \geq 20s$ beträgt die Standardabweichung der Deformationsmesung $\sigma_{\varepsilon_{yy}} = 0,09\%$ und ist damit immer noch fast doppelt so groß wie bei Rekonstruktion einer DFH-Serie mit 15 Einzelhologrammen, die mit je 4s Belichtungszeit aufgenommen werden. Bei Belichtungszeiten größer als 20s fällt der Streifenkontrast unter $\mu \leq 5\%$, wodurch die rekonstruierte Phase so stark verrauscht ist, dass die Ableitung einer Deformationskarte nicht mehr sinnvoll ist. Die in Tabelle 5.2 gelisteten Werte können als repräsentativ für die Limits der DFH im *Speziallabor Trieben* angesehen werden. Der Kontrast in DF-Hologrammen beträgt typischer Weise $\mu = 10 \dots 15\%$, wobei durchschnittlich Belichtungszeiten von $t_{exp} \approx 15 \dots 20s$ genutzt werden, in Ausnahmefällen auch $t_{exp} \approx 30s$. Längere Belichtungszeiten konnten trotz der optimalen Bedingungen hinsichtlich mechanischer Störungen im *Speziallabor Trieben* am *Tecnai F20 TEM* nicht sinnvoll eingesetzt werden. Die Anzahl der detektierten Elektronen hängt dabei noch von der verwendeten Zweistrahlbedingung und der Objektdicke ab (Abschnitt 5.11). Somit ist die Aufnahme einer DFH-Serie kurz belichteter Hologramme der Aufnahme lange belichteter Einzelhologramme hinsichtlich des Rauschens überlegen.

Trotz der Vorteile, die eine Serienaufnahme hinsichtlich der Signalqualität bietet, müssen

Aufwand und Nutzen abgewogen werden. Aufnahme und Rekonstruktion einer Serie sind zeitintensiver als die Aufnahme eines einzelnen Hologramms, auch wenn hierfür mittlerweile Routinen vorliegen, welche den Arbeitsaufwand deutlich reduzieren. Letztlich sollte das zu messende Signal als Kriterium dafür dienen, ob eine Serienaufnahme angemessener ist als Einzelaufnahmen mit längeren Belichtungszeiten. Je kleiner die zu messenden Deformationsfelder, desto stärker wirkt sich die Verringerung des Rauschens mit Hilfe der Serienaufnahme auf die Verbesserung des Signal-Rausch-Verhältnisses aus. Die kleinsten in dieser Arbeit gemessenen Deformationsfelder betragen $\varepsilon \lesssim 0,3\%$, wobei der Spannungseintrag in den Transistorkanal durch verspannte Schichten erfolgt. Hier zeigt schon die Serienaufnahme von DF-Hologrammen mit einem Rauschen in der Größenordnung $\mathcal{O}(\sigma_{\varepsilon_{yy}}) = 0,05\%$ den größten Vorteil gegenüber Einzelhologrammen mit $\mathcal{O}(\sigma_{\varepsilon_{yy}}) = 0,1\%$.

5.11 Maximierung der Intensität in der Beugungswelle

Die Signalqualität in der Deformationskarte hängt nach Gleichung (5.75) neben dem Kontrast der Hologrammstreifen maßgeblich von der Anzahl der detektierten Elektronen pro rekonstruiertem Pixel ab. Daher sollte die Intensität in der aufgezeichneten Beugungswelle so groß wie möglich sein. Dabei wird die Intensität durch Beleuchtungs- und Beugungsbedingung, sowie die Objektdicke bestimmt.

5.11.1 Zweistrahlfall und gekippte Dunkelfeldbeleuchtung

Zur Aufnahme von DF-Hologrammen empfiehlt es sich, den Kristall so zu orientieren, dass eine Zweistrahlbedingung für den ausgewählten Beugungsreflex erfüllt ist. Dadurch wird ein Abfluss der einfallenden Intensität in andere als den Nullstrahl und den gebeugten Strahl vermieden; in der Beugungswelle steht also mehr Intensität zur Verfügung. Die Wahl des Beugungsreflexes richtet sich dabei nach der Kristallrichtung, in welcher man die Gitterverzerrung bestimmen möchte. Für Halbleiterstrukturen auf (001)-Wafern interessiert die Gitterverzerrung im allgemeinen nur entlang der technologisch relevanten Richtungen [001] und [110]. Daher genügt es in der Regel, die Zweistrahlbedingung nur für den (004)- oder (004)-, sowie für den $(\bar{2}20)$ - oder (220)-Beugungsreflex einzustellen.

Abbildung 5.32 skizziert die Vorgehensweise zur Probenorientierung am Beispiel der (220)-Zweistrahlbedingung. Um eine definierte Ausgangsbedingung zu erhalten, wird die Probe zunächst auf den Pol der $[1\bar{1}0]$ -Zonenachse ausgerichtet. Im Beugungsbild beobachtet man die in Abbildung 5.32a gezeigte Anordnung der Beugungsreflexe und der zugehörigen Kikuchibänder. In dieser Anordnung befindet sich der Nullstrahl auf der optischen Achse (on-axis), während die Beugungsreflexe neben der optischen Achse angeordnet sind (off-axis). Im Prinzip könnte man bereits jetzt eine Dunkelfeldabbildung realisieren, indem man eine Blende in der hinteren Brennebene um gewünschten Beugungsreflex zentriert. Damit befände sich der abgebeugte Strahl jedoch nicht auf der optischen Achse. Dies könnte einerseits zu Aberrationen in der abgebeugten Welle führen. Andererseits müsste zur Aufzeichnung der DF-Hologramme auch das Biprisma leicht aus der optischen Achse in Richtung des Beugungsreflexes verschoben werden. Um diese Probleme zu vermeiden, sollte der abgebeugte Strahl entlang der optischen Achse verlaufen. Dazu wird die Probe zunächst aus der $[1\bar{1}0]$ -Zonenachse um die [110]-Achse verkippt. Dabei beobachtet man im Beugungsbild, wie der Nullstrahl sowie die (004)- und $(00\bar{4})$ -Beugungsreflexe entlang des (220)-Kikuchibandes in [001]-Richtung wandern (Abbildung 5.32b). Es entsteht eine systematische Reihe, bei der die Reflexe entlang der [110]-Richtung stärker angeregt sind als alle übrigen Reflexe. Anschließend verkippt man die Probe um den zweifachen Braggwinkel

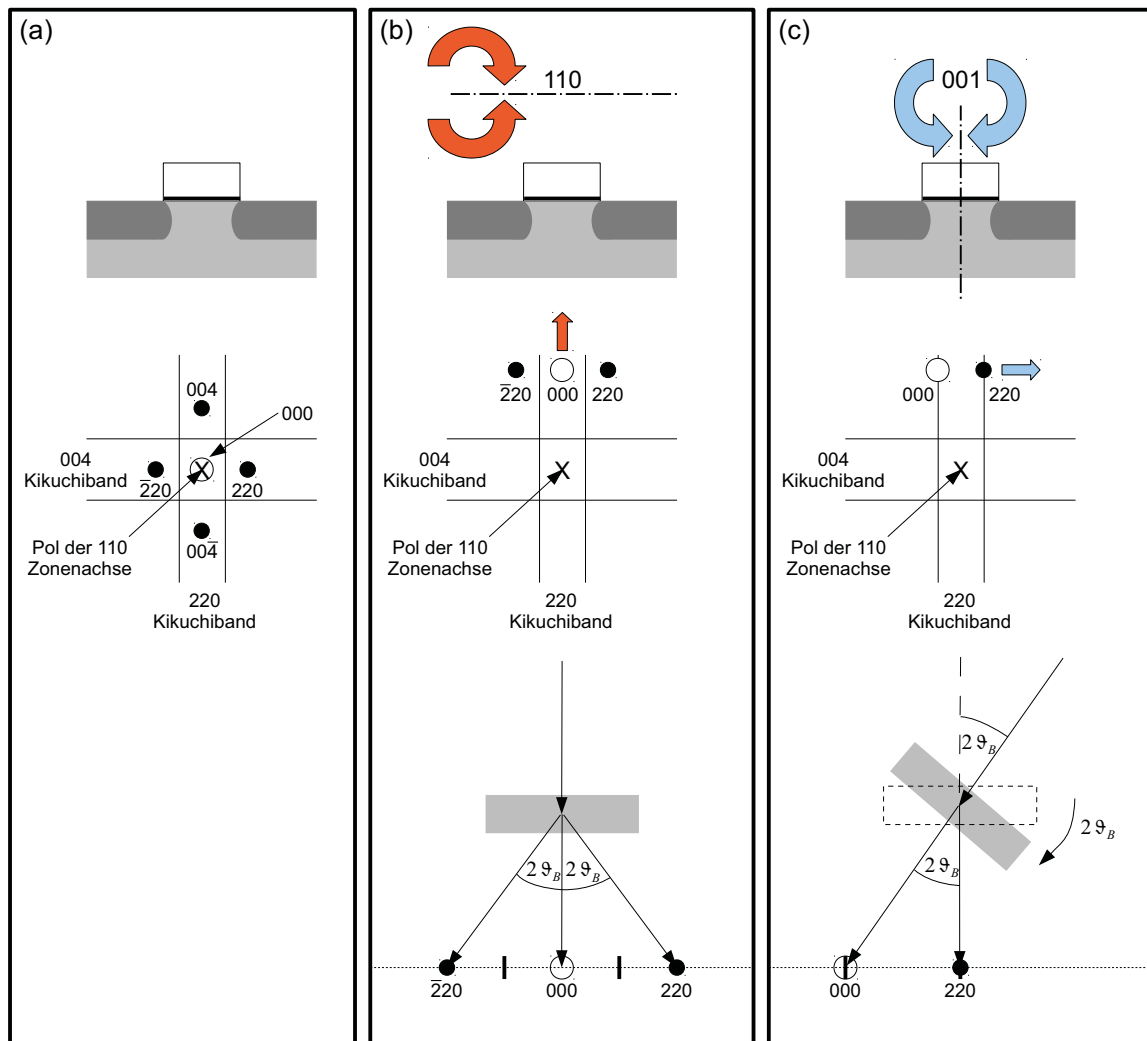


Abbildung 5.32: Orientierung der Probe in den (220)-Zweistrahlfall. a) Zentrieren der Probe auf den Pol der $[110]$ -Zonenachse. b) Probenkipfung um die $[110]$ -Achse. Im Beugungsbild beobachtet man die Anregung einer systematischen Reihe. c) Probenkipfung um die $[001]$ -Achse um den zweifachen Braggwinkel $2\vartheta_B$ bei gleichzeitiger Beleuchtungskippung um den gleichen Winkel. Der (220)-Strahl befindet sich auf der optischen Achse. Ausschneiden des (220)-Strahl mit einer Blende führt zur (220)-Dunkelfeldabbildung. Bei ungekippter Beleuchtung ergibt sich Hellfeldbeleuchtung.

$2\vartheta_B$ der (220)-Beugungsbedingung um die $[001]$ -Achse. Dabei kippt man, wie Abbildung 5.32c illustriert, gleichzeitig den einfallenden Strahl ebenfalls um den gleichen Winkel $2\vartheta_B$, so dass im Beugungsbild der Nullstrahl auf den linken Rand und der (220)-Reflex auf den rechten Rand des (220)-Kikuchibandes verschoben wird. Nun befindet sich der abgebeugte (220)-Strahl auf der optischen Achse. Er kann, mit einer um die optische Achse zentrierten Blende ausgeschnitten, zur Aufzeichnung eines (220)-DF-Hologramms verwendet werden. Außerdem erlaubt diese Einstellung am Mikroskop, in einfacher Art und Weise zwischen Hellfeldbeleuchtung (einfallender Strahl in Abbildung 5.32c auf optischer Achse) und Dunkelfeldbeleuchtung (einfallender Strahl in Abbildung 5.32c um ϑ_B gegenüber optischer Achse verkippt) zu wechseln, indem man die Beleuchtungskippung entsprechend ändert.

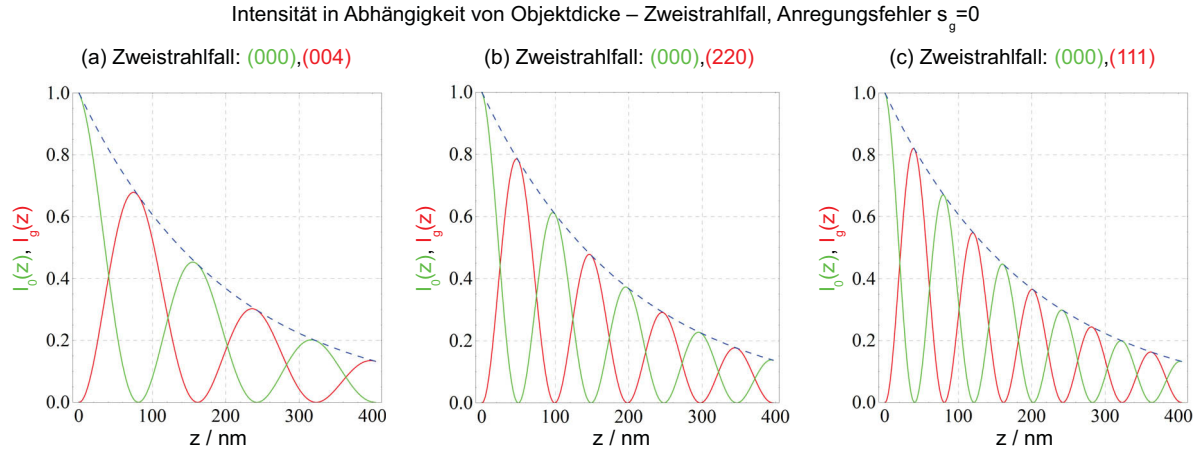


Abbildung 5.33: Intensitäten von Nullstrahl $I_0(z)$ und gebeugtem Strahl $I_g(z)$ für die Zweistrahlbedingungen (004), (220) und (111) bei exakter Bragg-Bedingung (Anregungsfehler $s_g = 0$). Die blau gestrichelte Linie beschreibt die objektickenabhängige Dämpfung der Intensität durch elastische und inelastische Wechselwirkung.

5.11.2 Optimale Probendicke

Im Zweistrahlfall gehorcht die Intensität von Nullstrahl $I_0(z)$ und gebeugtem Strahl $I_g(z)$ der Pendellösung aus Abschnitt 4.3.4.3. Die Gesamtintensität $I = I_0(z) + I_g(z)$ bleibt erhalten, wobei die Einzelintensitäten abhängig von Objektdicke z und Anregungsfehler s_g zwischen Nullstrahl und gebeugtem Strahl oszillieren (Abschnitt 4.3.4.3, Gleichungen (4.47) und (4.49)). Bei vernachlässigbarem Anregungsfehler s_g lauten die Intensitäten von Nullstrahl und gebeugtem Strahl:

$$I_0(z) = \cos^2(\pi\tilde{\zeta}_g z) \quad \text{und} \quad I_g(z) = \sin^2(\pi\tilde{\zeta}_g z), \quad (5.80)$$

wobei $\tilde{\zeta}_g$ die in Abschnitt 4.3.4.3 Gleichung (4.50) eingeführte Extinktionsdicke darstellt. Für ganzzahlige Vielfache der Extinktionsdicke $n\tilde{\zeta}_g$ ($n \in \mathbb{N}$) wird die Intensität des Nullstrahls maximal: $I_0(z = n\tilde{\zeta}_g) = I$, während die Intensität des gebeugten Strahls verschwindet: $I_g(z = n\tilde{\zeta}_g) = 0$. Dagegen wird für halbzahlige Vielfache der Extinktionsdicke $n\tilde{\zeta}_g/2$ ($n \in \mathbb{N}$) die Intensität des gebeugten Strahls maximal: $I_g(z = n\tilde{\zeta}_g/2) = I$, während die Intensität des Nullstrahls verschwindet: $I_0(z = n\tilde{\zeta}_g/2) = 0$. Somit lässt sich zumindest theoretisch maximale Intensität in der Beugungswelle erzielen, wenn die Objektdicke Vielfachen der halben Extinktionsdicke entspricht. Jedoch wird man experimentell diese perfekte Zweistrahlbedingung nie realisieren können. Tatsächlich beobachtet man im Experiment neben der auf Nullstrahl und gebeugten Strahl verteilten Intensität immer auch einen Abfluss von Intensität in andere Beugungsreflexe. Diese Reflexe bleiben im Beugungsbild zumeist schwach angeregt, obwohl sich die meiste Intensität wie gewünscht auf Nullstrahl und gebeugten Strahl verteilt. Die Verluste in andere Reflexe dämpfen also die Intensität von Nullstrahl und gebeugtem Strahl mit zunehmender Objektdicke. Dieser Effekt kann als Absorption in Folge elastischer und inelastischer Wechselwirkung aufgefasst werden und näherungsweise mit Hilfe der mittleren freien Weglängen λ_{el} für elastische und λ_{inel} inelastische Streuung als exponentielle Dämpfung beschrieben werden:

$$\sim \exp\left(-\frac{z(x,y)}{\lambda_{el}}\right) \exp\left(-\frac{z(x,y)}{\lambda_{inel}}\right). \quad (5.81)$$

	{004}		{220}		{111}		
t_{opt}	80 nm	242 nm	149 nm	248 nm	121 nm	202 nm	283 nm
I_g	0,67	0,30	0,48	0,29	0,55	0,36	0,24

Tabelle 5.3: Probendicken t_{opt} , für welche die Intensität I_g im abgebeugten Strahl ein Maximum annimmt.

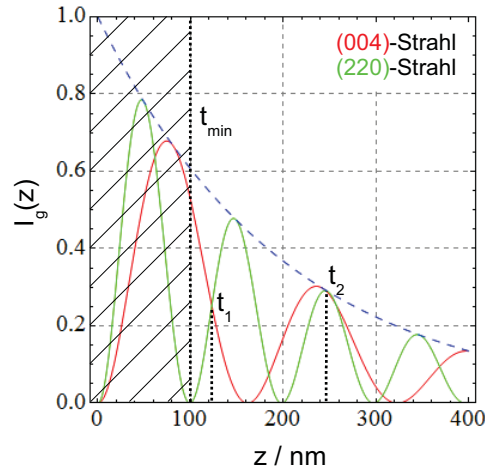


Abbildung 5.34: Intensität $I_g(z)$ des abgebeugten Strahls im Zweistrahlfall für die (004)- und (220)-Zweistrahlbedingung. Aufgrund der höheren Wahrscheinlichkeit für Relaxation sollte eine Objektdicke kleiner als $t_{min} = 100$ nm vermieden werden. Bei $t_1 = 123$ nm und $t_2 = 248$ nm besitzen (004)- und (220)-Strahl etwa eine gleiche große Intensität.

Abbildung 5.33 zeigt den Verlauf der Intensitäten von Nullstrahl $I_0(z)$ (grüne Kurve) und abgebeugtem Strahl $I_g(z)$ (rote Kurve) in exakter Bragg-Bedingung (Anregungsfehler $s_g = 0$) für die drei experimentell angewendeten Zweistrahlfälle {004}, {220} und {111}. Die blau gestrichelte Kurve kennzeichnet die durch elastische und inelastische Wechselwirkung hervorgerufene exponentielle Abschwächung der Intensität ($\lambda_{el} \approx \lambda_{inel} = 100$ nm in Si nach WOLF (2010)). Es tritt eine sehr schnelle Dämpfung der Gesamtintensität mit wachsender Objektdicke auf, so dass die Intensität bereits bei einer Objektdicke größer als $t = 200$ nm unter $1/e$ -tel der einfallenden Gesamtintensität sinkt. Da ab $t_{max} = 300$ nm weniger als 20 % der ursprünglichen Gesamtintensität zur Verfügung kann dies als obere Grenze für die Objektdicke angesehen werden. Die untere Grenze der Objektdicke wird zur Vermeidung von Relaxationseffekten auf $t_{min} = 100$ nm festgelegt. Tabelle 5.3 listet die möglichen, optimalen Objektdicken, sowie die entsprechenden Intensitäten im abgebeugten Strahl für die Zweistrahlbedingungen {004}, {220} und {111} auf. Die optimalen Dicken entsprechen jeweils $t_{opt} = 1/2 \xi_g$ oder $t_{opt} = 3/2 \xi_g$. Da die Extinktionsdicken jedoch für jede Beugungsbedingung g verschieden sind, kann eine Probe nicht für alle drei Zweistrahlbedingungen gleichzeitig auf optimale Probendicke präpariert werden. Einerseits kann die Probendicke für die {111}-Zweistrahlbedingung optimiert werden, um anschließend aus den {111}-Beugungswellen [001]- und [110]-Deformation gleichzeitig zu bestimmen. Andererseits kann die Probe auf $t_1 = 123$ nm oder $t_2 = 248$ nm präpariert werden, den Objektdicken, bei denen {004}- und {220}-Beugungswelle eine gleichgroße Intensität besitzen. Würde statt dessen z.B. nur einseitig auf eine Objektdicke von $t = 149$ nm für die {220}-Zweistrahlbedingung präpariert, hätte man zwar maximale Intensität im (220)-Strahl, aber keine Intensität im (004)-Strahl, da dieser dort ein Minimum besitzt (Abbildung 5.34).

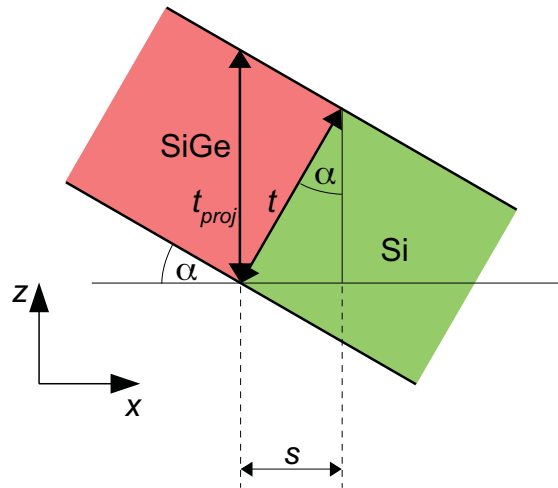


Abbildung 5.35: Verschmierung einer Grenzfläche zwischen zwei Kristallbereichen zu einem Streifen mit der Breite s durch Objektkippung um den Winkel α ; Objektdicke t , projizierte Objektdicke t_{proj} .

Inelastische Streuprozesse dämpfen mit zunehmender Objektdicke neben der Intensität auch den Interferenzstreifenkontrast:

$$\mu = \mu_0 \exp\left(-\frac{t}{2\lambda_{inel}}\right), \quad (5.82)$$

mit dem Kontrast μ_0 im Vakuum und λ_{inel} der mittleren freien Weglänge der Elektronen bei inelastischer Streuung. Im Sinne einer hohen Signalqualität im rekonstruierten DF-Hologramm sollte daher das Objekt auf die kleinstmögliche Dicke präpariert werden, bei der die Intensität der gewählten Zweistrahlbedingung maximiert wird, d.h. für $\{004\}$ - und $\{220\}$ -Zweistrahlfall auf $t = 123$ nm statt der ebenfalls möglichen $t = 248$ nm.

In der vorliegenden Arbeit wurden die Proben nach Maßgabe obiger Überlegungen mittels fokussiertem Ionenstrahlätzen (*focused ion beam, FIB*) auf eine optimale Probendicke von ca. $t = (120 \pm 15)$ nm präpariert.

5.12 Einfluss der Objektkippung an Grenzflächen

Da der Kristall zum Einstellen der Zweistrahlbedingung aus der Zonenachse verkippt wird (Abschnitt 5.11.1), muss die Frage geklärt werden, ob und welche unerwünschten Effekte an den verkippten Grenzflächen in der Bildebene auftreten.

Zunächst können Grenzflächen zwischen verschiedenen Strukturelementen bei Verkippen des Objekts ausgeschmiert werden. Wie Abbildung 5.35 illustriert, kann aus Objektdicke t und Objektkippung α die Aus schmierung der Grenzfläche mit $s = t \sin \alpha$ abgeschätzt werden. Legt man eine optimale Probendicke von 120 nm zu Grunde und berücksichtigt, dass in den Experimenten üblicherweise eine Objektkippung aus der Zonenachse um etwa $\pm 3^\circ$ eingestellt werden muss, um eine optimale Zweistrahlbedingung zu erzielen, erscheint eine Grenzfläche (oder eine dünne Schicht), die parallel zur Kippachse verläuft, als 6 nm breiter Streifen. Bei $\pm 6^\circ$ Kippung ist die Grenzfläche bereits zu einem 12 nm breiten Streifen verschmiert. Da jedoch die Lateralauflösung in der Dunkelfeldholographie

je nach verwendetem Abbildungsstrahlengang und Größe der Ausschneidemaske bei der Rekonstruktion auf 3...10 nm begrenzt ist, bewegen sich die Ausschmierungseffekte an Grenzflächen im Bereich der Auflösungsgrenze. Um Ausschmierungseffekte an Grenzflächen möglichst gering zu halten, wurden in den Experimenten Objektkippungen größer als $\pm 6^\circ$ aus der Zonenachse vermieden.

Durch die Objektkippung wird das zuvor in z-Richtung homogene Verschiebungsfeld an der Grenzfläche über den Ausschmierungsbereich z-abhängig. Wie Abbildung 5.35 zeigt, nimmt über die Breite s des Ausschmierungsbereiches die Dicke des SiGe-Bereiches von der projizierten Objektdicke t_{proj} bis auf Null ab, während die Dicke des Si-Bereiches entsprechend von Null auf die projizierten Objektdicke t_{proj} zunimmt. SiGe besitzt eine größere Gitterkonstante als Si, weshalb die Gitterkonstante im SiGe durch eine lineare Verschiebung des Si-Gitters beschreiben werden kann. Also ist das Verschiebungsfeld z-abhängig. Nach den Erläuterungen in Abschnitt 4.3.4 führt diese z-abhängige Änderung des Verschiebungsfeldes zu einer Änderung in der projizierten Phase der Beugungswelle gemäß

$$\varphi_g = -2\pi g \cdot \int_0^{t_{proj}} f_u^g(z, t_{proj}) u(z) dz, \quad (5.83)$$

mit g dem reziproken Gittervektor der aufgezeichneten Beugungswelle, $f_u^g(z, t_{proj})$ der in Abschnitt 4.3.4 eingeführten Wichtungsfunktion und $u(z)$ dem z-abhängigen Verschiebungsfeld. Einerseits wird der Kristall aus der Zonenachse senkrecht zur Gitterrichtung g in eine systematische Reihe verkippt. Die Kippwinkel können hierbei sehr groß werden bis zu einigen Grad. Andererseits werden beleuchtender Strahl und Objekt nach der Kippung aus der Zonenachse leicht in die Richtung parallel zur deformierten Gitterrichtung g verkippt, um den abgebeugten Strahl auf die optische Achse zu zentrieren und gleichzeitig aus der systematischen Reihe eine Zweistrahlbedingung herzustellen, in der nur noch gebeugter und ungebeugter Strahl angeregt sind. In dieser Richtung betragen die Objektkippungen $\vartheta_{220} = 13 \text{ mrad}$ oder $\vartheta_{004} = 18 \text{ mrad}$, so dass die Ausschmierungen der Objektkanten 1,5 nm für den (220)- und 2 nm für den (004)-Zweistrahlfall betragen. Somit spielen sich die Effekte von Projektion- und Wichtung des z-abhängigen Verschiebungsfeldes im Bereich unterhalb der Lateralauflösung ab. Sie sollten experimentell nicht zu beobachten sein.

Um die bisher getroffenen Aussagen experimentell zu verifizieren, werden (004)-DF-Hologramme einer mit SiGe verspannten Transistorstruktur unter verschiedenen Kippwinkeln aufgezeichnet und ausgewertet. Abbildung 5.36 zeigt zwei (004)-DF-Hologramme sowie die rekonstruierten Deformationskarten für $1,5^\circ$ und 5° Kippung aus der Zonenachse. In den rekonstruierten Deformationskarten der [001]-Gitterverzerrung wurden vier Linienprofile an identischen Objektstellen verglichen. Es werden Profilschnitte von den SiGe-Bereichen bei Source und Drain ins Si-Substrat entlang der [001]-Richtung untersucht (Profile I und II) sowie von Source zu Drain entlang der [110]-Richtung (Profil III). Ein weiteres Profil IV zeigt entlang der [111]-Richtung von Source ins Si-Substrat. Die Profile I, II und IV zeigen nahezu identische Verläufe für $1,5^\circ$ und 5° Kippung. Einzig im Profil III wird im Si-Substrat zwischen Source und Drain für $1,5^\circ$ Kippung eine Abweichung des Deformationswerts von $\Delta\varepsilon = -0,1\%$ gegenüber 5° Kippung ermittelt. Insgesamt betrachtet sind die Abweichungen nicht größer als die Messgenauigkeit von $\sigma_\varepsilon = 0,1\%$. Daher können die Abweichungen nicht zweifelsfrei mit der Verkipfung der Probe in Zusammenhang gebracht werden. Hierbei sollte auch beachtet werden, dass die Qualität des DF-Hologramms bei $1,5^\circ$ Kippung mit einem Kontrast von

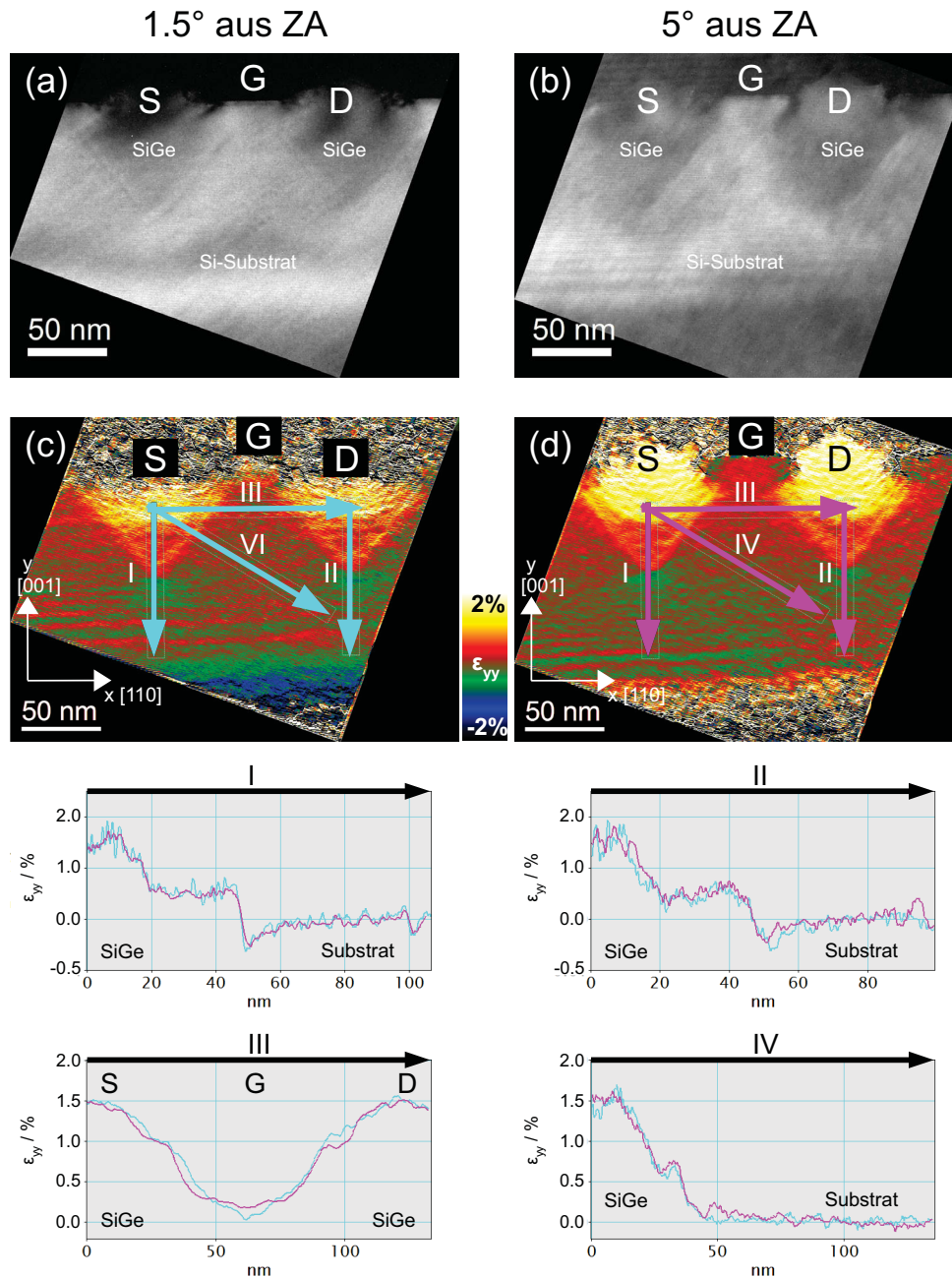


Abbildung 5.36: Einfluss von Objektkippung auf die Deformationsmessung: a) (004̄)-DF-Hologramm eines mit SiGe verspannten Transistors bei 1,5° Kippung aus der Zonenachse. b) (004̄)-DF-Hologramm an gleicher Objektstelle bei 5° Kippung aus Zonenachse. c) und d) rekonstruierte Deformationskarten. Die Profile I, II, IV vom SiGe ins Si-Substrat zeigen identische Verläufe. Das Profil III von Source zu Drain zeigt leichte Abweichungen; für 1,5° Kippung ist der Deformationswert zw. S. u. D. kleiner als bei 5° Kippung.

$\mu = 5\%$ und $N = 1100$ detektierten Elektronen pro CCD-Pixel deutlich schlechter als bei 5° Kippung mit $\mu = 9\%$ und $N = 2900$ ist. Hierin zeigt sich eine weitere Einschränkung für die Objektkippung: Sie kann nicht beliebig auf einen zuvor festgelegten Wert eingestellt werden, da im Experiment bei bestimmten Objektkippungen einfach keine optimale Zweistrahlsbedingung realisiert werden kann. So wurde unter anderem noch ein drittes (004)-DF-Hologramme bei $2,3^\circ$ Kippung aufgezeichnet, das jedoch aufgrund des reduzierten Kontrastes $\mu = 5\%$ und der geringen Anzahl an detektierten Elektronen pro CCD-Pixel $N = 360$ lediglich die Rekonstruktion einer so stark verrauschten Phase erlaubte, aus der keine auswertbare Deformationskarte abgeleitet werden konnte. Es gelang auch nicht, bei diesem Kippwinkel DF-Hologramme besserer Qualität aufzuzeichnen.

Als Konsequenz für die präzise Messung von Deformationsfeldern in Halbleiterstrukturen lässt sich festhalten: Falls Abweichungen der Deformationswerte aufgrund von Objektkippung existieren, besitzen sie die Größenordnung der Messgenauigkeit, sind also praktisch kaum nachweisbar. Um Kippeffekte sicher auszuschließen, können bei der Untersuchung einer Struktur DF-Hologramme bei drei bis vier unterschiedlichen Objektkippungen im Bereich von $\pm(2^\circ \dots 6^\circ)$ aufgezeichnet und anschließend verglichen werden werden. Bisher konnte dabei noch kein Einfluss der Objektkippung beobachtet werden (BÉCHÉ *et al.* 2011). Größere Kippwinkel als $\pm 6^\circ$ werden in dieser Arbeit vermieden. Die Aufnahme von DF-Hologrammen wird auf Kippungen beschränkt, bei denen die Aufnahme von DF-Hologrammen mit guter Qualität (d.h. mit hohem Streifenkonstrat und hoher Intensität) gelingt.

5.13 Präparationseinflüsse

Die Probenpräparation für die DFH erfolgt mittels fokussiertem Ionenstrahlätzen (*focused ion beam, FIB*). Hierbei wird mit einem fokussiertem Strahl aus beschleunigten Ga^+ -Ionen gezielt Material auf der Probe abgetragen, bis eine durchstrahlbare TEM-Lamelle von optimaler Dicke und gewünschter lateraler Ausdehnung entsteht. Weil die FIB-Präparation eine relativ einfache und zeitsparende Methode ist, sowie eine äußerst präzise Präparation erlaubt, hat sie sich als Standardmethode für die Zielpräparation von Transistorstrukturen in der Halbleiterindustrie etabliert. Allerdings besitzt sie aufgrund der Oberflächenschädigungen durch die Ga^+ -Ionen nicht zu vernachlässigende Einflüsse auf den Deformationszustand im Kristall. Im schlimmsten Fall kann eine starke Veränderung des Deformationszustandes in der TEM-Lamelle eine deutliche Verfälschung der Deformationsmessung nach sich ziehen. In diesem Abschnitt werden kritische Einflüsse der Probenpräparation und Strategien zu deren Vermeidung diskutiert.

5.13.1 Curtaining

Mit Curtaining wird ein Artefakt bei der Probenpräparation mit FIB bezeichnet, bei dem ein ungleichmäßiger Materialabtrag stattgefunden hat. Curtaining tritt besonders bei Präparation strukturierter Halbleiterproben auf, wenn der Materialabtrag mit dem Ionenstrahl von der strukturierten Seite zum Substrat hin erfolgt. Die Strukturen oberhalb des Substrats (z.B. Source-/Drain-Kontakt, Gate, Trenches...) bestehen aus unterschiedlichen Materialien, so dass diese vom Ionenstrahl unterschiedlich stark und schnell abgetragen werden. Weil sie das darunter liegende Si-Substrat abschatten, erfolgt auch der Abtrag des Si-Substrats unterhalb der verschiedenen Strukturen und Materialien unterschiedlich stark und schnell. So entstehen im Si-Substrat lokale Variationen der Objektdicke.

Der Einfluss von Curtaining auf die Deformationsmessung lässt sich eindrucksvoll an dem Beispiel in Abbildung 5.37 erläutern. Bei der Probe handelt es sich um Transistoren, welche durch ins Si-Substrat eingebettete Source-/Drain-Kontakte aus SiGe kompressiv verspannt sind. Bereits im DF-Hologramm lässt sich Curtaining in Form von Intensitätsvariationen mit abwechselnd hellen und dunklen Streifen im Si-Substrat unterhalb der Transistorstrukturen beobachten (Abbildung 5.37a). In der rekonstruierten Phase führt Curtaining zu einer Modulation im Si-Substrat; man beobachtet leichte Phasengradienten mit alternierendem Vorzeichen (Abbildung 5.37c). Nach Ableiten der Deformationskarte aus der Dunkelfeldphase äußert sich Curtaining als vermeintliche leicht zwischen kompressiv und tensil wechselnde Deformation im Si-Substrat. Da man jedoch sicher davon ausgehen kann, dass das Si-Substrat tatsächlich absolut frei von Deformationen ist, kann es sich bei den beobachteten Modulationen im Si-Substrat nur um einen Artefakt aufgrund von Curtaining handeln.

In Abschnitt 4.3.4.2 wurde bei der Diskussion der Beugungswelle im Zweistrahlfall gezeigt, dass die Beugungswelle $\psi_g(z)$ neben der geometrischen Phase $\varphi_g = -2\pi \mathbf{g} \cdot \mathbf{r}$ auch eine Phasenschiebung durch das mittlere innere Potential V_0 des Kristalls beinhaltet: $\psi_g(\mathbf{r}, z) \sim e^{i\varphi_g} e^{iC_E V_0 z}$ (C_E ist die Wechselwirkungskonstante, V_0 ist im Si-Substrat konstant). An der Austrittsfläche des Kristalls ergibt sich die Phasenschiebung des mittleren inneren Potentials durch Integration über die Objektdicke $t(x, y)$; die Beugungswelle ist im Ortsraum proportional zu:

$$\psi_g(\mathbf{r}) \sim e^{i\varphi_g} e^{iC_E V_0 t(x, y)}. \quad (5.84)$$

Bei der DFH wird diese Welle $\psi_g(\mathbf{r}) = \psi_{roi}(\mathbf{r})$ mit einer Referenzwelle $\psi_{ref}(\mathbf{r}) \sim e^{iC_E V_0 t(x, y)}$ überlagert, die keine geometrische Phase, sondern idealerweise nur die gleiche Phasenschiebung des mittleren inneren Potentials besitzt wie $\psi_g(\mathbf{r})$. Für $t(x, y) = t_0 = \text{const.}$ verschwindet der Anteil des mittleren inneren Potentials bei der Überlagerung der Teilwellen. Bei Curtaining jedoch variieren die Objektdicken im verspannten Bereich und im Referenzbereich, weshalb die Phasenanteile des mittleren inneren Potentials im verspannten Kristall $\varphi_{roi}(\mathbf{r})$ und im Referenzbereich $\varphi_{ref}(\mathbf{r})$ verschieden sind. Aus dem DF-Hologramm rekonstruiert man nun die Phase:

$$\tilde{\varphi}_g(\mathbf{r}) = 2\pi \mathbf{g} \cdot \mathbf{u} + \varphi_{roi}(\mathbf{r}) - \varphi_{ref}(\mathbf{r}), \quad (5.85)$$

die neben den Gradienten der geometrischen Phase auch die durch Curtaining hervorgerufene Anteil $\Delta\varphi_c(\mathbf{r}) = \varphi_{roi}(\mathbf{r}) - \varphi_{ref}(\mathbf{r})$ beinhaltet. Dadurch wird beim Ableiten der Deformationskarte die Information über die ursprüngliche Verzerrung \mathbf{u} verfälscht; z.B. die Deformation in x -Richtung:

$$\varepsilon_{xx} = \frac{1}{2\pi g} \frac{\partial \varphi_r(\mathbf{r})}{\partial x} = \frac{u_{xx}(x, y)}{\partial x} + \frac{\Delta\varphi_c(x, y)}{\partial x}. \quad (5.86)$$

Um Curtaining bereits bei der Präparation zu vermeiden, bietet es sich an, den Materialabtrag in der FIB von der Substratseite zur strukturierten Seite der Probe durchzuführen; man spricht von Rückseitenpräparation. Stellt man fest, dass eine Probe durch Curtaining beeinträchtigt wurde, existiert die (eingeschränkte) Möglichkeit, die Artefakte des Curtaining in der rekonstruierten Phase zu korrigieren. Dazu wird ein Nullstrahl-Hologramm an genau der gleichen Objektstelle wie das DF-Hologramm aufgezeichnet. Nullstrahl-Hologramm bedeutet, dass zur Aufzeichnung des Hologramms nur die Intensität des Nullstrahls benutzt wird. Die so aufgezeichnete Welle $\psi_N(\mathbf{r}) \sim e^{iC_E V_0 t(x, y)}$ beinhaltet einzig die Phasenschiebung durch das mittlere innere Potential sowohl im verspannten Bereich als auch im Referenzbereich,

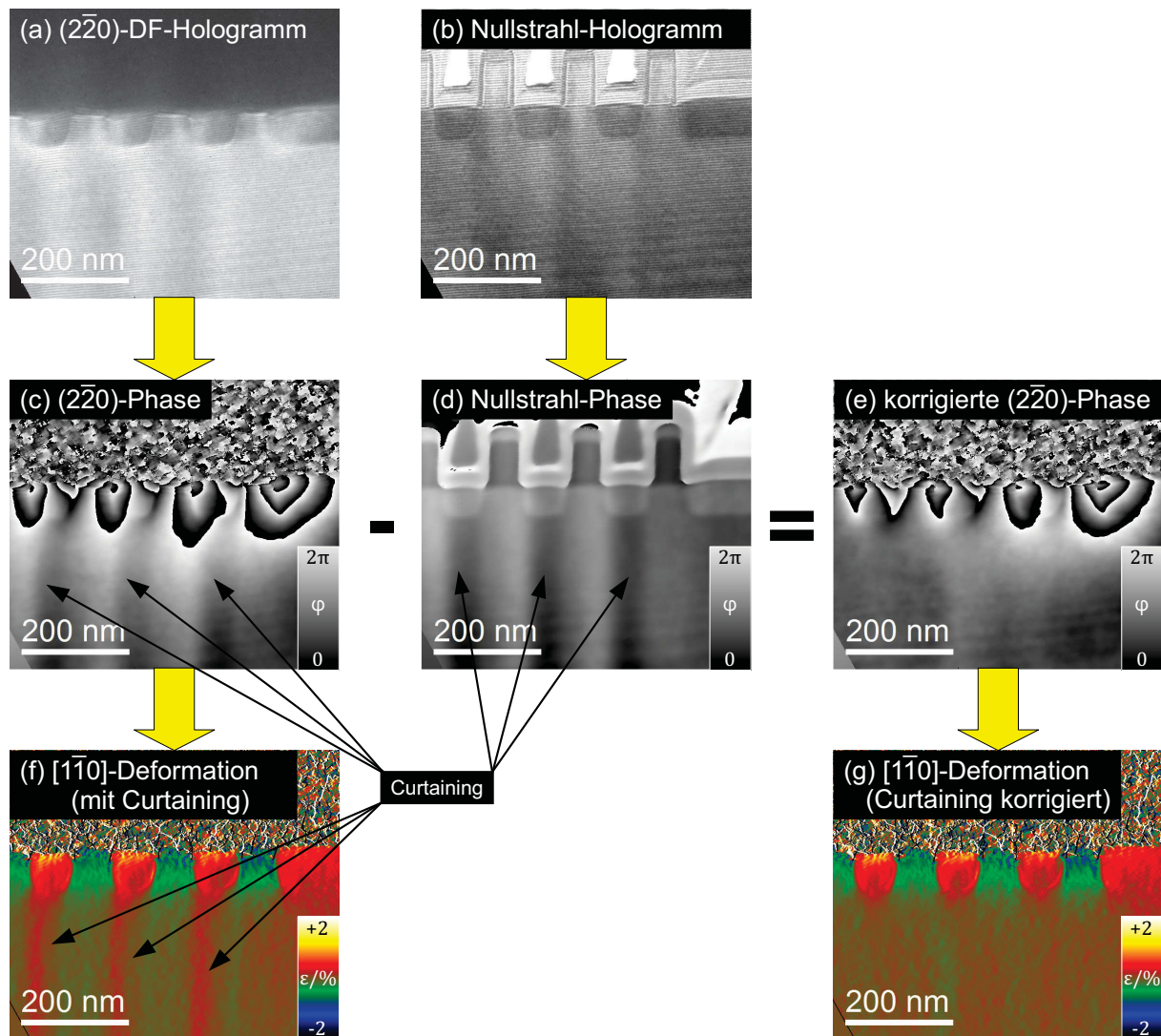


Abbildung 5.37: Korrektur von Curtaining-Artefakten in der rekonstruierten Phase des Dunkelfeldhologramms. a) $(2\bar{2}0)$ -Dunkelfeldhologramm einer mit SiGe kompressiv verspannten Transistorstruktur. b) Nullstrahlhologramm an der gleichen Objektstelle. c) Rekonstruierte Phase der $(2\bar{2}0)$ -Beugungswelle. d) Rekonstruierte Phase des Nullstrahlhologramms. e) Von Curtaining korrigierte Phase der $(2\bar{2}0)$ -Beugungswelle nach Subtraktion von c) und d). f) Deformationskarte der $[1\bar{1}0]$ -Gitterverspannung mit Curtaining-Artefakten abgeleitet aus c). g) Deformationskarte der $[1\bar{1}0]$ -Gitterverspannung nach Korrektur der Curtaining-Artefakte abgeleitet aus f).

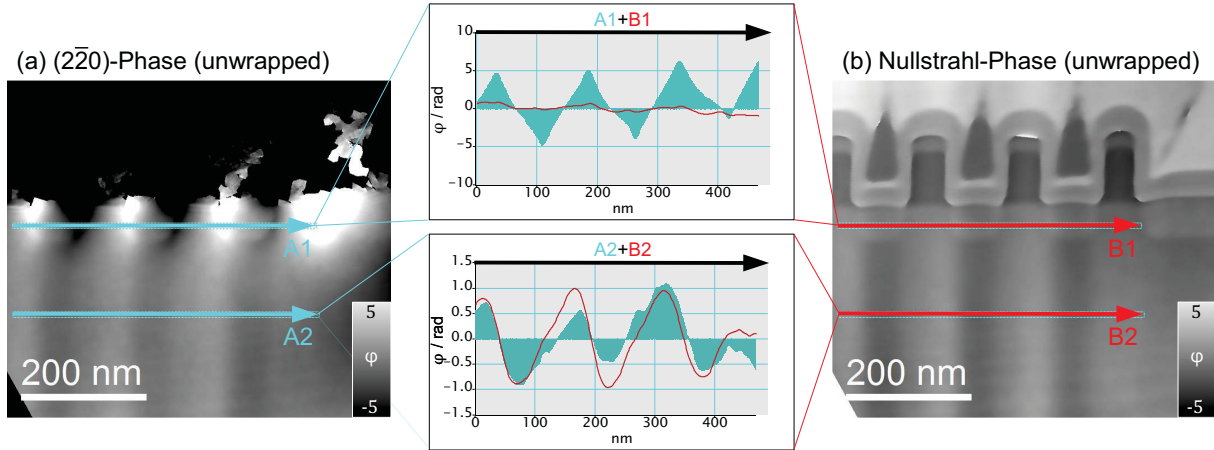


Abbildung 5.38: Rekonstruierte Phase der $(2\bar{2}0)$ -Dunkelfeldwelle und des Nullstrahls. Die Linienprofile zeigen den Verlauf der Phasenwerte im verspannten Silizium unterhalb der Transistorgates und im Si-Substrat.

aber keine geometrische Phase. Durch Division von rekonstruierter Beugungswelle und Nullstrahlwelle bleibt nur der Anteil der geometrischen Phase übrig:

$$\psi_{g,corr}(\mathbf{r}) \sim \frac{\psi_g(\mathbf{r})}{\psi_N(\mathbf{r})} \sim \frac{e^{i\varphi_g} e^{iC_E V_0 t(x,y)}}{e^{iC_E V_0 t(x,y)}} \sim e^{i\varphi_g}. \quad (5.87)$$

Abbildung 5.38 zeigt die rekonstruierte Phase der (220) -Beugungswelle mit Curtainingartefakten sowie die entsprechende Nullstrahlphase für das Beispiel aus Abbildung 5.37. Die bei der Aufnahme von DF- und Nullstrahlhologramm auftretenden Abweichungen in der Objektposition werden bei der Rekonstruktion mit einem Skript in *DigitalMicrograph* subpixelgenau korrigiert. Die zufälligen Phasenoffsets in Beugungswellen- und Nullstrahlphase werden so angepasst, dass Beugungswellen- und Nullstrahlphase im Si-Substrat nahezu identische Verläufe besitzen und Abweichungen zwischen den Verläufen minimal sind.

Die Linienprofile A1 und B1 in Abbildung 5.38 verlaufen unterhalb der Transistorgates durch das verspannte Si und die Source/Drain-Bereiche aus SiGe. Das Profil A1 in der Phase der Beugungswelle zeigt die für diese Struktur typischen starken zickzackförmigen Gradienten entlang der $[110]$ -Richtung, wobei Phasenwerte von $\varphi_g = \pm 10 \dots 15$ rad erreicht werden. Das Profil B1 in der Nullstrahlphase besitzt einen nahezu flachen Verlauf; hier beträgt $\varphi_N = 1 \dots 3$ rad. Die Linienprofile A2 und B2 verlaufen durch das Si-Substrat. Das Profil A2 zeigt aufgrund der Dickenvariationen durch Curtaining ebenfalls zickzackförmige Gradienten, obwohl man im ungestörten Si einen flachen Verlauf erwarten würde. Die Phase erreicht Werte von bis zu $\varphi_g = \pm 1$ rad. Das Profil B2 der Nullstrahlphase beschreibt einen zu A2 ähnlichen Phasenverlauf. Die laterale Position des Curtaining wird in A2 und B2 identisch wiedergegeben. Das Signal weicht jedoch zwischen $x_1 = 170$ nm und $x_2 = 230$ nm deutlich voneinander ab. Hier besitzt die Phase der Beugungswelle mit $\varphi_g = \pm 0,5$ rad einen lediglich halb so großen Wert wie die Nullstrahlphase mit $\varphi_g = \pm 1$ rad.

Indem die Nullstrahlphase von der mit Artefakten behafteten Beugungswellenphase subtrahiert wird, lässt sich das Curtaining nachträglich aus der Phase der Beugungswelle eliminieren. Abbildung 5.39 erlaubt, artefaktbehaftete und korrigierte $[110]$ -Deformationskarte zu vergleichen. Die Linienprofile befinden sich an den gleichen Positionen wie in Abbildung 5.38. Zwischen den Profilen A1 und B1 unterhalb der

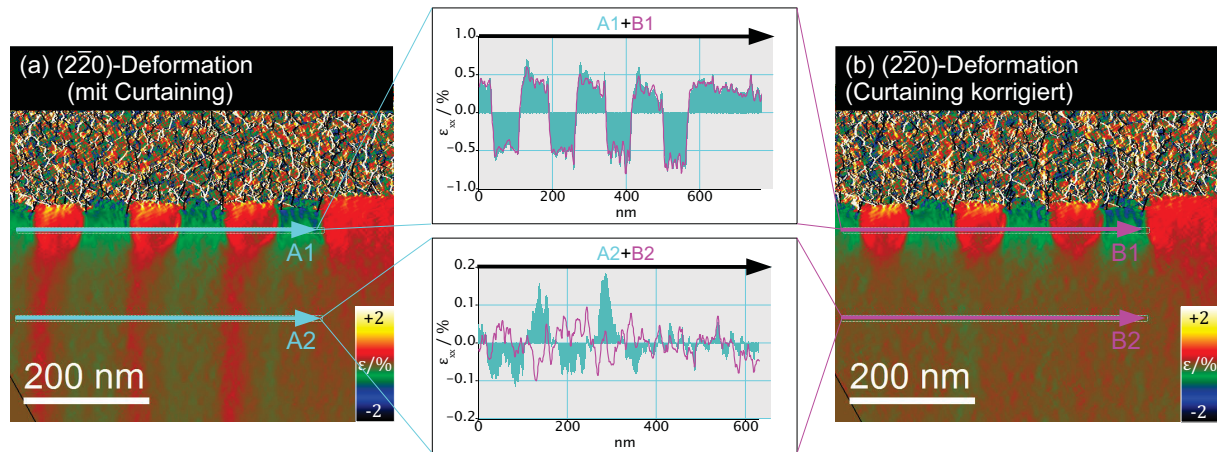


Abbildung 5.39: Deformationskarten mit und ohne Korrektur der Curtaining-Artefakte.

Transistorgates lässt sich kein signifikanter Unterschied feststellen, weil die durch das verspannte Si und das SiGe hervorgerufenen Phasengradienten stärker als die durch Curtaining verursachten artifiziellen Phasengradienten sind (vgl. Profile A1 und B1 in Abbildung 5.38). Dagegen lassen sich die Curtainingartefakte in Abbildung 5.39 bereits mit bloßem Auge als Streifenmuster im Si-Substrat erkennen. In Profil A2 stellt man eine regelmäßige, abwechselnde Schwankung des Deformationswertes um $\text{varepsilon}_{xx} = -0,1 \dots +0,15\%$ fest. Nach Curtainingkorrektur betragen diese Abweichungen nur noch $\epsilon_{xx} = \pm 0,05\%$ und bewegen sich damit in der Größenordnung des Rauschens, das durch räumliche Mittlung unterhalb der SiGe-Schicht zu $\sigma_{\epsilon_{xx}} = 0,05\%$ bestimmt wird. Trotz Curtainingkorrektur lässt sich in Abbildung 5.39b vereinzelt immer noch ein abgeschwächtes Streifenmuster im Si-Substrat beobachten, genau an den Stellen, an denen bereits das Signal von Beugungswellen- und Nullstrahlphase voneinander abweicht. Hier tritt nun eine leichte Überkompensation der Curtainingartefakte auf, weil die Gradienten in der Nullstrahlphase größer sind als in der Beugungswellenphase. Die Korrektur von Curtainingartefakten funktioniert also nur eingeschränkt. Denn die durch Curtaining verursachten Phasenmodulationen lassen sich zwar lateral exakt in der Nullstrahlphase registrieren, aber nicht mit dem gleichen Signal wie in der Phase der Beugungswelle. Die Vorstellung, dass jede Beugungswelle die gleiche zusätzliche Phasenschiebung proportional zum mittleren inneren Potential und zur Objektdicke erfährt wie der Nullstrahl, stellt also lediglich eine Näherung dar. Es ist zu erwarten, dass bereits die geringen Unterschiede in der dynamischen Streuung von Nullstrahl und Beugungswelle zu den beobachteten Abweichungen zwischen Nullstrahl- und Beugungswellenphase und den damit verbundenen Einschränkungen bei der Curtainingkorrektur führen. Zusätzlich könnte auch die beim Wechsel von DF- zu HF-Abbildung auftretende Beleuchtungsdrift unterschiedliche Aufnahmebedingungen von DF- und Nullstrahlhologramm hervorgerufen haben, wodurch das Curtaining im Nullstrahlhologramm nicht genauso erfasst wurde wie im DF-Hologramm.

5.13.2 Relaxation in FIB-Lamellen

Durch die FIB-Präparation werden zwangsläufig freie Oberflächen erzeugt, die zu einer Änderung des Deformationszustandes in der TEM-Lamelle führen. Die Relaxation von Verspannungen in einem periodischen Übergitter untersuchten Treacy und Gibson 1985 in einer theoretischen Arbeit (TREACY *et al.* 1985; TREACY und GIBSON 1986). Dazu

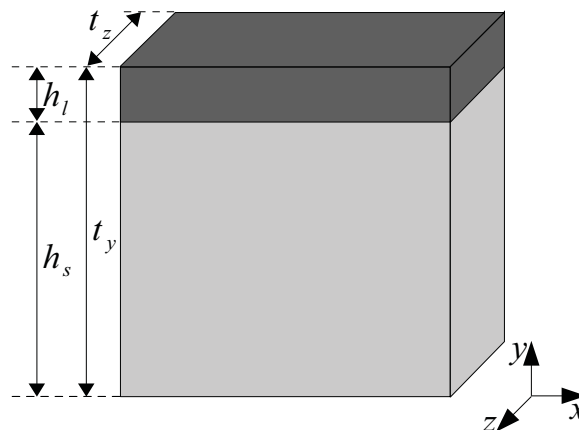


Abbildung 5.40: Geometrie einer TEM-Lamelle mit einer verspannten Schicht auf einem unverspannten Substrat. Die Verspannung in der Schicht beginnt zu relaxieren, sobald die Schichtdicke h_l die Größenordnung der Lamellendicke t_z erreicht.

betrachteten sie ein verspanntes, in $[001]$ -Richtung orientiertes Übergitter in einem kubischen Kristall. Mit Hilfe von Fourier-Reihen-Entwicklungen konnten sie die Relaxation des Verspannungszustandes, die durch Reduzierung der Probendicke entlang der $[001]$ -Richtung hervorgerufen wird, analytisch beschreiben. Ihre Erkenntnisse lassen sich qualitativ auf eine einzelne biaxial verspannte Schicht auf einem unverspannten Substrat übertragen (Abbildung 5.40). Der Grad der Relaxation der verspannten Schicht bestimmt sich aus dem Verhältnis von Lamellendicke t_z in z -Richtung zur Breite der Schicht h_l in y -Richtung (PONCHET *et al.* 2011). Es existieren zwei Grenzfälle: Ist die Lamellendicke sehr viel größer als die Schichtdicke $t_x \gg h_l$, bleibt die biaxiale Verspannung der Schicht in x - und y -Richtung erhalten. Nimmt die Lamellendicke t_z bis zur Größenordnung der Schichtdicke $h_l \approx t_z$ ab, tritt in-plane eine vollständige Relaxation des Deformationszustandes auf; lediglich in z -Richtung bleibt eine uniaxiale Verspannung erhalten (TREACY *et al.* 1985; TREACY und GIBSON 1986).

Da für die in dieser Arbeit untersuchten Strukturen im allgemeinen keine analytischen Modelle zur Verfügung stehen, kann der Einfluss der Relaxation auf den Deformationszustand einzig numerisch mittels Finite-Elemente-Rechnungen modelliert werden. Ein konkretes Beispiel für eine mittels einer Deckschicht aus Wolfram tensil verspannte Transistorstruktur wird in Abschnitt 6.4 diskutiert. Für die $t_{obj} = 150 \text{ nm}$ dicke Probe wird die $[\bar{1}\bar{1}0]$ -Gitterdeformation im Transistorkanal experimentell bestimmt und mit einer FE-Simulation für den Bulkzustand verglichen. Dabei zeigt sich, dass die experimentellen Werte um 10 % von den Bulkwerten abweichen. Diese Ergebnisse stehen im Einklang mit Beobachtungen von HÛTCH *et al.* (2008) an mit Source/Drain-Kontakten aus SiGe verspannten Transistoren. Für die 120 nm dicke TEM-Lamelle wurde der Verspannungszustand für die Extremfälle einer unendlich dünnen Lamelle, sowie einer unendlich dicken Lamelle (Bulk) simuliert. Ein Vergleich von Simulation und Experiment für den $[110]$ -Deformationszustand zeigt, dass die gemessenen Werte zwischen den beiden Extremfällen liegen, jedoch dichter an den Bulkwerten (HÛTCH *et al.* 2012a).

Ein weiterer Hinweis auf den Einfluss von Relaxation und Objektdicke findet sich bei ALEXANDRE *et al.* (2008). Hier wurde das Relaxationsverhalten an einer 100 nm dicken SiGe-Schicht mit 3 % Germaniumkonzentration eingebettet in Si-Substrat untersucht. Deformationsmessungen mit konvergenter Elektronenbeugung und Vergleiche mit FE-Simulation für Lamellendicken von 100...200 nm lassen auf eine Relaxation der

in-plane Komponente der Deformation von ca. 5 % gegenüber dem Bulkwert schließen. Aufgrund dieser Ergebnisse kann der Relaxationseffekt für die in DFH benutzten optimalen Objektdicken $t_{obj} = 100 \dots 200 \text{ nm}$ eher gering eingeschätzt werden. Er muss jedoch bei der quantitativen Interpretation und Diskussion der Ergebnisse berücksichtigt werden. Im Allgemeinen beträgt die Relaxation durch die freien Oberflächen der TEM-Lamelle 10 % und überschreitet niemals mehr als 30 % des ursprünglichen Deformationszustandes (HÛTCH *et al.* 2012a). Möchte man eine DFH-Messung ohne Vergleich mit einer FE-Simulation des Bulkzustandes auswerten, muss man also von einem relativen, systematischen Fehler von mindestens 10 % ausgehen, um den die DFH-Messung an der TEM-Lamelle von dem Bulkzustand abweicht.

5.13.3 Amorphe Oberflächen

Die FIB-Präparation erzeugt amorphe Oberflächen an den Seitenflächen der TEM-Lamelle. Sie tragen zwar nur unwesentlich zum Signal in der Beugungswelle bei, jedoch reduzieren sie die effektive kristalline Dicke der TEM-Lamelle. Dies muss während der Präparation zur Abschätzung der optimalen Objektdicke berücksichtigt werden. Im TEM wird die tatsächliche kristalline Objektdicke mit konvergenter Elektronenbeugung (*convergent electron beam diffraction*, CBED) gemessen. Mittels Hellfeld-TEM-Aufnahmen an Siliziumnadeln mit rechteckigem Querschnitt konnte nachgewiesen werden, dass bei FIB-Präparation mit Ga^+ -Ionen mit einer Beschleunigungsspannung von 30 kV die amorphe beidseitige Oberflächenschicht ca. 20 nm beträgt (LENK 2008). Durch Reduzierung der Beschleunigungsspannung auf 5 kV im finalen Präparationsschritt gelingt es, die Dicke der amorphen Oberflächenschicht zu verringern (COOPER *et al.* 2009). Allerdings kann bei derart niedrigen Beschleunigungsspannungen der Ga^+ -Ionen eine parallele Präparation der Seitenflächen nicht mehr gewährleistet werden. Die Parallelität der Seitenflächen ist jedoch Voraussetzung, durch dynamische Beugung hervorgerufene Biegekontruren und Dickenlinien in der TEM-Lamelle zu vermeiden. Als Kompromiss zwischen geringer Amorphisierung und Parallelität der Oberflächen wird eine Präparation mit 8 kV Beschleunigungsspannung vorgeschlagen (COOPER *et al.* 2010a, 2011). In dieser Arbeit wurde dabei jedoch eine starke Verbiegung der TEM-Lamellen beobachtet, weshalb die TEM-Lamellen größtenteils bei 30 kV Beschleunigungsspannung präpariert wurden.

Aus Untersuchungen mit holographischer Tomographie ist bekannt, dass zusätzlich zu der amorphen Oberflächenschicht beidseitig eine ca. 20 nm dicke Übergangsschicht in das kristalline Innere der TEM-Lamelle existiert (WOLF 2010). Es ist davon auszugehen, dass diese Schicht wie ein in z-Richtung veränderliches Deformationsfeld wirkt, mit all den in Abschnitt 4.3.4.5 diskutierten Konsequenzen auf das detektierte Signal in der Bildebene. Aufgrund der komplexen Wirkung von z-abhängigen Deformationsfeldern auf die zweidimensionale Deformationsmessung ist es schwierig, den tatsächlichen Einfluss der gestörten Schicht abzuschätzen. In den experimentellen Ergebnissen in Abschnitt 6 konnten bisher auch keine Effekte nachgewiesen werden, die eindeutig auf die Übergangsschicht zurückzuführen wären.

5.13.4 Verbiegung von FIB-Lamellen

Bei FIB-Präparation von TEM-Lamellen kann es zu deren Verbiegung kommen. Gründe hierfür können großflächige Verspannungen sein, die durch den lokal begrenzten Materialabtrag hervorgerufen werden, oder Relaxationen z.B. von funktionellen, auch verspannten Deckschichten oberhalb von Transistorstrukturen und Si-Substrat. Dabei besteht

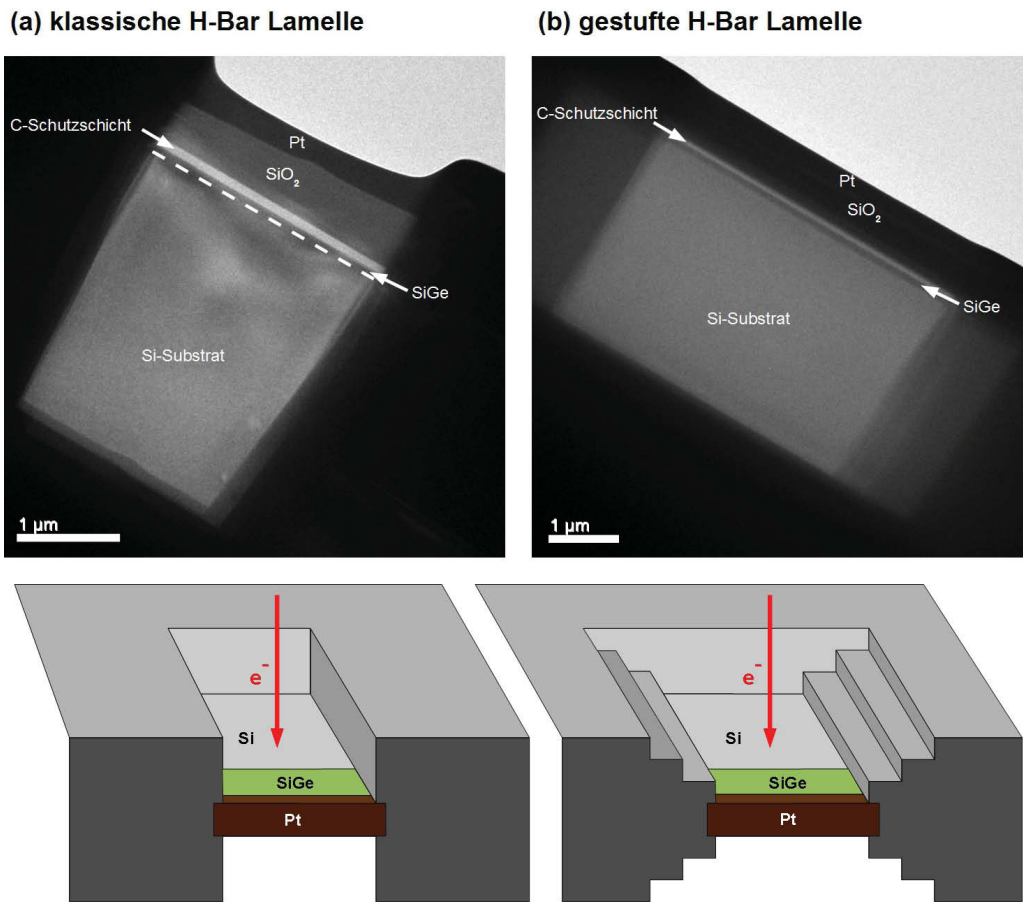


Abbildung 5.41: Vermeidung von Verbiegungen in H-Bar-Lamellen: a) HF-Aufnahme einer klassisch präparierten H-Bar-Lamelle mit Biegekonturen. Spannungen, die vom rechten und linken Rand in die Lamelle wirken führen zu einer Verbiegung. b) Präparation von Stufen am rechten und linken Rand ermöglicht, Spannungen zu relaxieren. Die Lamelle wird nicht verbogen.

die Gefahr, dass die großflächigen Verbiegungen den ursprünglichen Spannungszustand an den Transistoren überlagern und/oder verändern. Außerdem führt die Verbiegung einer TEM-Lamelle zu Biegekonturen und Dickenlinien, welche Intensität und Streifenkontrast und somit die Signalqualität der DF-Hologramme verringern.

Abbildung 5.41a illustriert die Verbiegung einer klassischen H-Bar-Lamelle. Der Name leitet sich von der Querschnittsform der dünnen TEM-Lamelle ab, die ähnlich wie der waagerechte Strich im Buchstaben H, zwischen den bezogen auf die Lamellendicke vergleichsweise dicken Bereich der Probe eingebettet ist. Die Probe besteht aus einer SiGe-Schicht auf Si-Substrat. Darüber befindet sich eine dünne Kohlenstoffschicht, welche eine Relaxation der SiGe-Schicht, während der weiteren Prozessierung des Wafers verhindern soll, gefolgt von einer Schicht aus Siliziumoxid SiO_2 . Um die Struktur bei der FIB-Präparation vor Veränderungen durch den hochenergetischen Ionenstrahl zu schützen, ist darauf eine Schutzschicht aus Platin abgeschieden. Da die Breite der TEM-Lamelle geringer ist als ihre Tiefe, können Spannungen, die in den dicken Bereichen links und rechts der TEM-Lamelle auftreten, einzig in die Lamelle abgeleitet werden. Diese Spannungen verursachen ein Verbiegen der Lamelle, was sich anhand der Biegekontur in der Hellfeld-TEM-Abbildung 5.41a erkennen lässt. Anders als in der HF-Holographie, z.B. bei der Analyse von Dotiergebieten in Halbleitern, lassen sich diese Biegekonturen nicht durch Probenkipfung in eine kinematische Beugungsbedingung eliminieren, da zur Aufnahme der DF-Hologramme immer eine

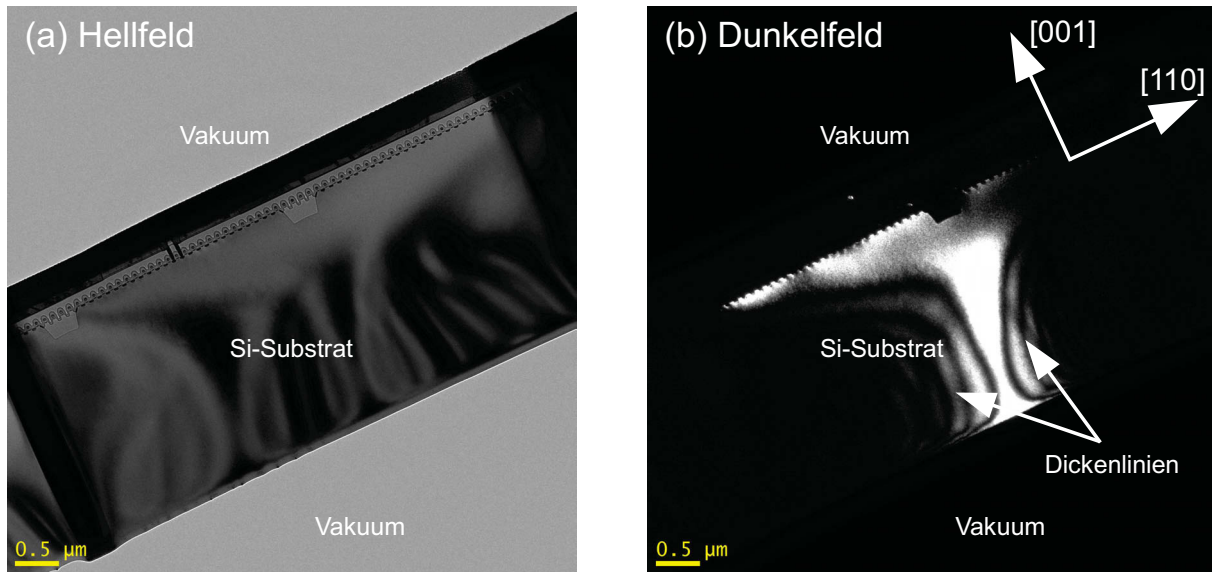


Abbildung 5.42: Lift-out Lamelle: a) Biegekonturen im Si-Substrat deuten auf starke lokale Verbiegungen hin. b) Dickenlinien in der (220)-DF-Aufnahme als Zeichen des Durchbiegens der Lamelle.

bestimmte Zweistrahlbedingung mit wohl definierter Probenkipfung erforderlich ist. Um die von den Rändern der Probe ausgehenden Spannungen gezielt abzuleiten und so eine Verbiegung der Lamelle zu vermeiden, wurde eine schrittweise FIB-Präparation der Lamelle so durchgeführt, dass an den Rändern Stufen entstehen (Abbildung 5.41b). Diese verringern den Druck der dickeren Probenbereich auf die Lamelle. Es treten keine sichtbaren Verbiegungen der TEM-Lamelle auf.

Abbildung 5.42 zeigt Hell- und Dunkelfeldbild einer Lift-out-Lamelle im (220)-Zweistrahlfall. Die Biegekonturen in der Hellfeldabbildung deuten auf Verbiegungen der Lamelle im Si-Substrat hin. In der Dunkelfeldabbildung lassen Dickenlinien, die senkrecht zur [110]-Richtung verlaufen, darauf schließen, dass die Lamelle entlang der [110]-Richtung durchgebogen ist. Die gleichmäßige Intensität unterhalb der Transistorstrukturen ist ein Indiz dafür, dass die Objektdicke an diesen Stellen homogen und die Verbiegung geringer als im Si-Substrat ist. Damit sind DFH-Untersuchungen in diesen Bereichen der Probe möglich. Verbiegungen sind bei Lift-out-Lamellen häufiger zu beobachten als bei klassischen H-Bar-Lamellen. Im Gegensatz zur H-Bar-Lamelle, welche in eine massive Probe eingefasst ist, stellt die Lift-out-Lamelle eine dünne TEM-Lamelle dar, die an einer einzigen Stelle fest mit einem massiven TEM-Grid verbunden ist, aber ansonsten freistehend ist. Dabei begünstigen die vielen freien Ränder der Lamelle Verbiegungen. Dieser Effekt ist umso stärker, je dünner die Lamellen präpariert werden. Meist wurde dieser Effekt bei Lamellendicken $t_{obj} < 100$ nm beobachtet. Daher muss bei Lift-out-Lamellen sorgfältig darauf geachtet werden, dass die optimale Probendicke von $t_{opt} \approx 120$ nm nicht unterschritten wird.

5.14 Zusammenfassung

In diesem Abschnitt wurde zunächst das Grundprinzip der Dunkelfeld off-axis Elektronenholographie zur Messung mechanischer Spannungen in einem Halbleiterkristall vorgestellt. Es wurden Aufbau des Experiments, Aufnahme eines DF-Hologramms, sowie dessen Rekonstruktion und die Ableitung der Deformationskarte beschrieben. Anschließend wurden verschiedenste methodische Aspekte beleuchtet. Dazu gehört, den

DFH-Aufbau an die instrumentellen Gegebenheiten im *Speziallabor Trieben* anzupassen, sowie hinsichtlich der Anforderungen der Halbleiterindustrie an Lateral- und Signalauflösung zu optimieren. Durch Anwendung der Pseudo-Lorentz Linse am *Tecnai F20* TEM können DF-Hologramme mit einer Lateralauflösung von $1/q_{res} = 3\text{ nm}$ oder $1/q_{res} = 10\text{ nm}$ aufgezeichnet werden. Dabei beträgt das Gesichtsfeld zwischen $w_{hol} = 200\text{ nm}$ oder $w_{hol} = 800\text{ nm}$. Die Signalauflösung wird durch Hologrammstreifenkontrast und Intensität in der abgebeugten Welle bestimmt. Maximale Belichtungszeiten betragen typischer Weise $t_{exp} = 15 \dots 20\text{ s}$, wobei ein Kontrast von etwa $\mu = 10 \dots 15\%$ erreicht und durchschnittlich $N_{CCD} \approx 1500$ Elektronen pro CCD-Pixel registriert werden; die so erzielbare Signalauflösung beträgt $\sigma_\varepsilon = \pm 0,1\%$. Durch Aufnahme und Rekonstruktion einer Dunkelfeldhologrammserie kann die Signalauflösung auf $\sigma_\varepsilon = \pm 0,05\%$ verbessert werden.

Die Intensität in der abgebeugten Welle wird durch eine Zweistrahlbedingung gesteigert. Die optimale Probendicke orientiert sich an der Vielfachen der halben Extinktionslänge der gewählten Zweistrahlbedingung. Um die Objektdicke für (004)- und (220)-Zweistrahlbedingung gleichzeitig zu optimieren, sollte die Objektdicke $t \approx 120\text{ nm}$ betragen. Die durch Objektkippung verursachten Projektionseffekte an Grenzflächen spielen bei den erreichbaren Lateralauflösungen keine Rolle; sie lassen sich experimentell nicht beobachten. Bei der FIB-Präparation der Proben muss auf parallele Seitenflächen der TEM-Lamelle geachtet werden. Verbiegungen führen zu Biegekonturen- und Dickenlinien, welche Kontrast und Intensität in den Hologrammen zerstören. Curtaining sollte ebenfalls vermieden werden, da es fälschlicher Weise als Deformation interpretiert werden kann. Eine nachträgliche Korrektur ist begrenzt möglich. Relaxation in dünnen TEM-Lamellen führt zu einem bis zu 10 % kleineren Deformationswert, als mit Finite-Elemente-Rechnungen für den Bulk vorhergesagt wird.

Ein Aufbereiten der DF-Hologramme vor der Rekonstruktion vermeidet Artefakte in der späteren Deformationskarte; dazu zählen die Korrektur fehlerhafter Pixel und die Filterung der Fresnelschen Beugungssäume vom Biprisma. Eine Korrektur der Projektiv- und Kameraverzerrungen mittels Leerhologramm oder Hologrammserie erscheinen angebracht, auch wenn die Verzerrungen in den meisten Fällen weniger als 1 Pixel betragen, also mindestens eine Größenordnung kleiner sind als die zu messenden Deformationen. Eine Wienerfilterung der DF-Hologrammintensität kann das Rauschen in der Deformationskarte um den Faktor $1,5 \dots 2$ reduzieren.

Ob die Rekonstruktion des Seitenbandes aus dem DF-Hologramm mit einem Butterworth- oder sinc-Filter geschieht, bringt keine Unterschied hinsichtlich der Signalauflösung mit sich. Allerdings provoziert das sinc-Filter eine kleinere Delokalisierung, was bei Bildung der Ableitung der Deformationskarte aus benachbarten Pixeln von Vorteil ist. Nach der Rekonstruktion verschlechtert die numerische Ableitung der Deformationskarte aus der Phasenverteilung das Signal-Rausch-Verhältnis. Durch geschickte Wahl des Ableitungskernels lässt sich das Rauschverhalten optimieren; das geringste Rauschen in der Deformationskarte tritt auf, wenn die Ableitung im zentralen Pixel als symmetrische Differenz der beiden benachbarten Pixel berechnet wird. Eine Glättung der Phasenverteilung durch Anwendung eines Glättungsfilters erlaubt, die Signalauflösung auf $\sigma_\varepsilon \approx \pm 0,03\%$ zu verbessern, wobei man jedoch deutlich an Lateralauflösung einbüßt.

6 Verspannungsmessungen an aktuellen Halbleiterstrukturen

Dieses Kapitel widmet sich der Anwendung der Dunkelfeldholographie (DFH) zur Messung von Gitterverspannungen an ausgewählten Halbleiterstrukturen. Als erstes Anwendungsbeispiel wird die Deformation einer SiGe-Schicht vermessen, die epitaktisch auf Si-Substrat aufgewachsen wurde. Dabei handelt es sich um jene Struktur, welche bereits in Kapitel 5 des öfteren als Teststruktur zur Illustration methodischer Aspekte der DFH herangezogen wurde. In diesem Kapitel wird die Verspannung der SiGe-Schicht anhand der Epitaxie von SiGe auf Si-Substrat erklärt, was es erlaubt, die Ergebnisse der DFH-Messung mit einem analytischen Modell für die Gitterdeformation zu vergleichen. Dies erklärt, wieso sich SiGe-Schichten hervorragend als Teststrukturen in der DFH eignen (BÉCHÉ *et al.* 2011; DENNEULIN *et al.* 2014).

Als zweites Anwendungsbeispiel wird die Deformation im Kanalbereich von Transistoren untersucht, die mittels SiGe-Source/Drain-Gebieten verspannt werden. Die untersuchten Halbleiterstrukturen ähneln jenen, an denen bereits Martin Hýtch die Anwendung der DFH demonstriert hat (HÝTCH *et al.* 2008). Da diese Art der Spannungsgeneration in Transistoren in der Halbleiterindustrie sehr häufig eingesetzt wird, stellt die Vermessung der so erzeugten Deformationsfelder das mit Abstand wichtigste Anwendungsgebiet der DFH im Rahmen der Analyse (*engl.: metrology*) von Halbleiterbauelementen dar (COOPER *et al.* 2009, 2010a; ZHU *et al.* 2012). Dieser Abschnitt widmet sich neben Strukturen mit klassischen „U-förmigen“ SiGe-Source/Drain-Bereichen auch jenen mit SiGe-„Σ“-Source/Drain-Bereichen. Außer den Deformationen entlang der technologisch relevanten Kristallrichtungen [110] und [001] werden an diesen Strukturen weitere den Deformationszustand beschreibende Größen, wie Scherung, Rotation und Dilatation bestimmt. An den Transistoren mit „U-förmigen“ SiGe-Bereichen erfolgt eine Vergleichsmessung zwischen DFH und der bereits als Methode zur Deformationsmessung etablierten Nanobeugung (NBD). Es werden Gemeinsamkeiten und Unterschiede, sowie die jeweiligen Vor- und Nachteile der Methoden diskutiert; die Übereinstimmung der Messergebnisse dient als Beleg für Richtigkeit und Zuverlässigkeit der dunkelfeldholographischen Messungen. Einen besonderen Platz nehmen die mittels SiGe verspannten *Silicon-on-insulator*- (SOI-) Strukturen ein. Aufgrund der räumlichen Trennung von SOI und Si-Substrat durch die Isolatorschicht ergeben sich spezielle Herausforderungen an die DFH: Die Hologrammbreite muss entsprechend vergrößert werden, was die Lateralauflösung einschränkt. Zusätzlich tritt, bedingt durch den Herstellungsprozess von SOI-Wafern, eine leichte Missorientierung von SOI und Si-Substrat, dem Referenzbereich, auf; die Auswirkungen auf die Deformationsmessung werden untersucht.

Als drittes Anwendungsbeispiel werden Transistoren untersucht, in denen die Verspannung des Transistorkanals mittels speziell verspannter Nitrid-Deckschichten (PEN) erzeugt wird. Die Fähigkeiten der DFH werden dabei sowohl an tensil als auch an kompressiv verspannten Transistorstrukturen demonstriert. Vergleiche mit NBD-Messungen und Finite-Elemente-Simulationen sollen Richtigkeit und Genauigkeit der DFH-Ergebnisse untermauern. Dabei wird auch auf die Herausforderungen eingegangen, welche die extrem kleinen Deformationsfelder in den PEN-Strukturen an die Signalauflösung in der DFH stellen.

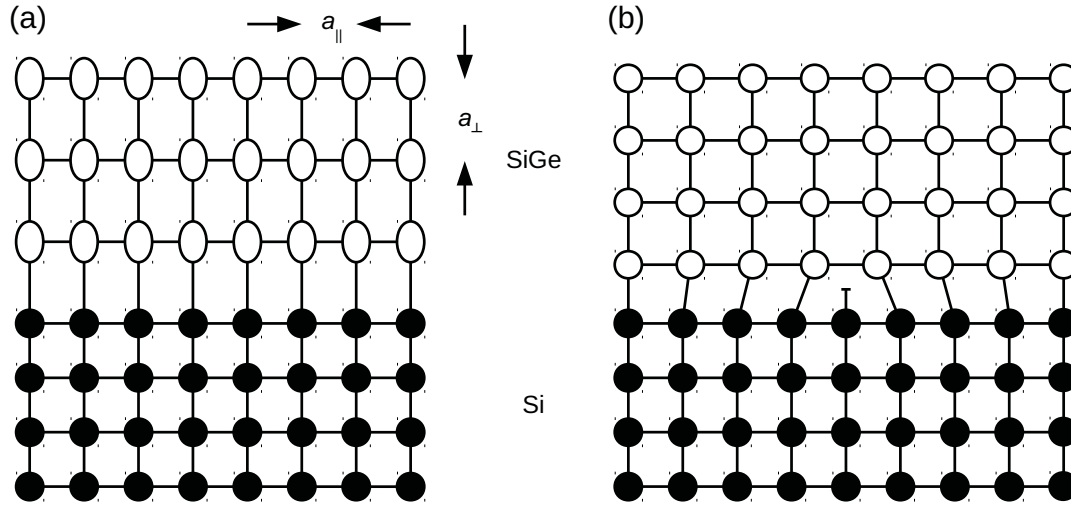


Abbildung 6.1: Gitterstruktur einer pseudomorphen (a) und vollständig relaxierten (b) SiGe-Schicht auf Si-Substrat.

6.1 Gitterdeformation in SiGe-Schicht auf Si-Substrat

Um die Methode der DFH zu etablieren und deren Grenzleitung zu bestimmen, bietet es sich an, diese an Objekten mit einfacher Geometrie und bekannter Deformationsverteilung zu testen. Dazu wurden seitens GLOBALFOUNDRIES zwei Proben angefertigt.

Probe I. besteht aus einer $d_1 = 40$ nm dicken SiGe-Schicht auf Si-Substrat. Die Ge-Konzentration in der Schicht beträgt $c_{SiGe} = 21\%$. Die Probendicke wurde mittels konvergenter Elektronenbeugung (CBED) zu $t_1 = (160 \pm 10)$ nm bestimmt.

Probe II. besteht aus einer $d_2 = 30$ nm dicken SiGe-Schicht mit einer Ge-Konzentration von $c_{SiGe} = 25\%$ auf Si-Substrat. Die Probendicke wurde mittels eines HF-Hologramms aus der Phasendifferenz

$$\Delta\varphi = C_E V_0 t_2. \quad (6.1)$$

des Si-Substrats bzgl. des Vakuums bestimmt (MÖLLENSTEDT und KELLER 1957). Mit der Wechselwirkungskonstante für 200 kV-Elektronen $C_E = 0,0072 / \text{V nm}$, dem mittleren inneren Potential von Si $V_0 = 12,0$ V und einer gemessenen Phasendifferenz $\Delta\varphi = 14,5$ rad ergibt sich eine Probendicke $t_2 = (165 \pm 5)$ nm.

Si und Ge kristallisieren beide in der Diamantstruktur. Sie können daher zu einem Mischkristall $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ mit beliebiger Ge-Konzentration $0 \leq x \leq 1$ legiert werden. Die Gitterkonstante von Ge ($a_{SiGe} = 0,5646$ nm) ist gut 4,18% größer als die von Si ($a_{Si} = 0,5451$ nm), jedoch gehorcht die Gitterkonstante des Mischkristalls SiGe nicht exakt dem Vegardschen Gesetz. Statt dessen ergibt sich die Gitterkonstante von SiGe in Abhängigkeit von der Ge-Konzentration x zu (DISMUKES *et al.* 1964):

$$a_{Si_{1-x}Ge_x} = (0,0027x^2 + 0,020x + 0,5431) \text{ nm}, \quad (6.2)$$

und die relative Änderung der Gitterkonstanten zu (DISMUKES *et al.* 1964):

$$\varepsilon = \frac{a_{Si_{1-x}Ge_x} - a_{Si}}{a_{Si}} = 0,00501x^2 + 0,03675x. \quad (6.3)$$

Wird die SiGe-Schicht wie im vorliegenden Fall epitaktisch entlang der $[001]$ -Richtung auf das

	c_{11}	c_{12}
Si	166,0	64,0
Ge	126,0	44,0
Si _{0,79} Ge _{0,21}	156,0	59,0
Si _{0,75} Ge _{0,25}	157,6	59,8

Tabelle 6.1: Elastische Konstanten für Si und Ge (LEVINSHTEIN *et al.* 1999), sowie mit Hilfe des Vegardschen Gesetzes genähert für die untersuchten SiGe-Mischkristalle in GPa.

Si-Substrat aufgewachsen, wird der SiGe-Schicht in $[110]$ -Richtung die Gitterkonstante des Si-Substrats aufgezwungen und erfährt eine kompressive Verspannung. Dabei ist perfektes epitaktisches Wachstum der SiGe-Schicht nur solange möglich, bis deren Dicke d eine kritische Dicke nicht überschreitet, bei der sich Versetzungen bilden, wodurch die SiGe-Sicht relaxiert (MATTHEWS und BLAKESLEE 1976).

SiGe, das pseudomorph, d.h. frei von Versetzungen, auf Si-Substrat entlang der $[001]$ -Richtung aufgewachsen wurde, zeigt eine tetragonale Verzerrung der Einheitszelle (Abb. 6.1) mit einer in-plane Gitterkonstanten $a_{||}$ in $[110]$ -Richtung (x -Richtung) und einer dazu senkrechten Gitterkonstanten a_{\perp} in $[001]$ -Richtung (y -Richtung) (CRESSLER 2005):

$$a_{||} = a_{Si}, \quad a_{\perp} = a_{Si}(1 + k\varepsilon), \quad \text{mit} \quad k = 1 + 2\frac{C_{12}}{C_{11}}. \quad (6.4)$$

Hierin sind C_{11} und C_{12} die in Abschnitt 2.3 eingeführten elastischen Konstanten, deren Werte für den SiGe-Mischkristall mit Hilfe des Vegardschen Gesetzes aus den Werten für Si und Ge genähert werden können (Tabelle 6.1). Für eine vollständig relaxierte SiGe-Schicht dagegen sind $a_{||}$ und a_{\perp} gleich:

$$a_{||} = a_{\perp} = a_{Si}(1 + \varepsilon). \quad (6.5)$$

Für eine teilweise relaxierte Schicht hängt die Gitterkonstante sowohl von der Ge-Konzentration als auch vom Grad der Relaxation ab (ZAUMSEIL 1994). Solange nicht bekannt ist, ob die SiGe-Schicht pseudomorph oder vollständig relaxiert ist, müssen immer $a_{||}$ und a_{\perp} gemessen werden, um die Ge-Konzentration und den Grad der Relaxation bestimmen zu können.

Für Probe I. mit einer SiGe-Schicht mit einem Ge-Gehalt von 21 % beträgt die relative Änderung der Gitterkonstanten von SiGe ($a_{SiGe} = 0,5474 \text{ nm}$) und Si ($a_{Si} = a_{||} = 0,5451 \text{ nm}$) $\varepsilon = 0,79 \%$. Die pseudomorphe SiGe-Schicht besitzt daher in $[001]$ -Richtung die Gitterkonstante $a_{\perp} = 0,5506 \text{ nm}$. Man erwartet in dieser Richtung eine Gitterdeformation von:

$$\varepsilon_{yy} = \frac{a_{\perp} - a_{||}}{a_{||}} = 1,38 \%. \quad (6.6)$$

Um die Änderung der Gitterkonstanten in $[001]$ -Wachstumsrichtung zu untersuchen, werden die $\{004\}$ -Beugungswellen des SiGe-Gitters mit denen des Si-Substrats überlagert. Abbildung 6.2 zeigt ein (004) -DF-Hologramm von Probe I. und die daraus rekonstruierte (004) -Phase, sowie die $[001]$ -Deformationskarte mit einer Lateralauflösung von 3,3 nm. Die Linienprofile von der SiGe-Schicht ins Si-Substrat werden in Phase und Deformationskarte über eine Breite von 64 CCD-Pixeln (= 4 rek. Pixel) gemittelt. Das Rauschen in der Deformationskarte beträgt in der SiGe-Schicht $\sigma_{\varepsilon_{yy}} = \pm 0,2 \%$, im Si-Substrat $\sigma_{\varepsilon_{yy}} = \pm 0,1 \%$. Die rote Kurve im Linienprofil II. beschreibt den geglätteten Deformationsverlauf, den man erhält, wenn die rekonstruierte (004) -Phase wie in Abschnitt 5.9 beschreiben mit einem

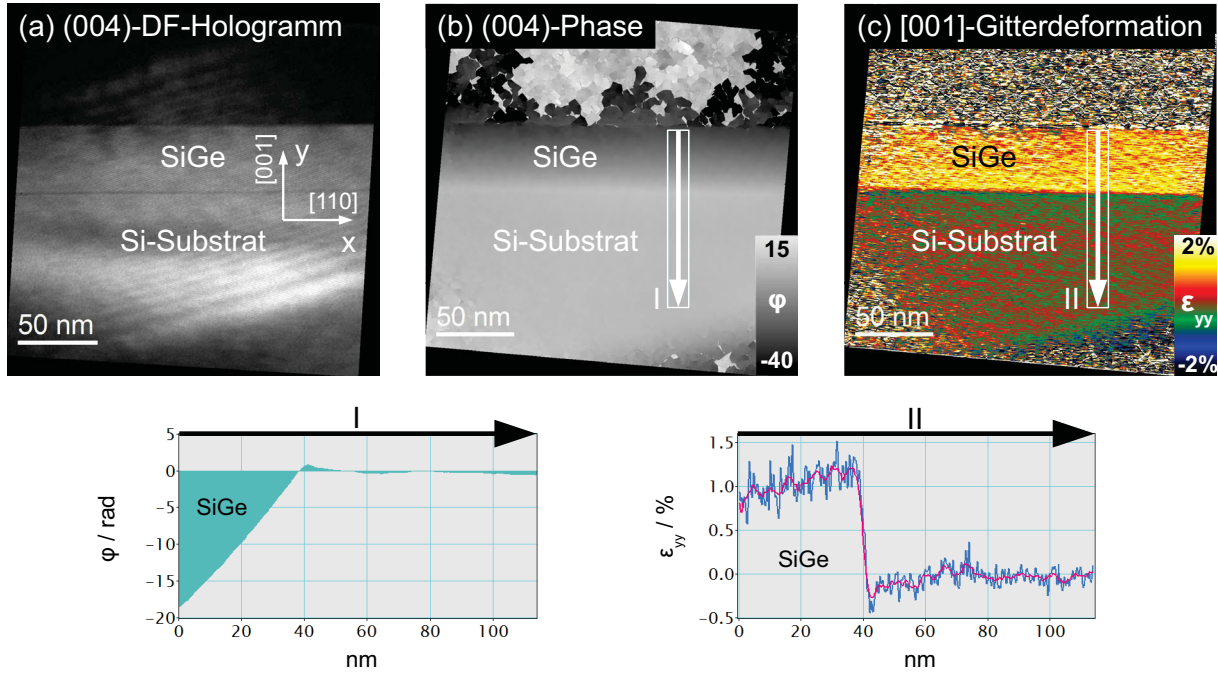


Abbildung 6.2: Gitterdeformation an Si/SiGe-Grenzfläche – Probe I.: a) (004)-DF-Hologramm. b) Rekonstruierte (004)-Phase. c) Abgeleitete [001]-Deformationskarte. Linienprofil II. mit stark verrauschtem (blau) und geglättettem (rot) Deformationsprofil.

harten, 16×16 CCD-Pixel großen Glättungsfilter geglättet und daraus anschließend die geglättete Deformationskarte abgeleitet wird. An der Grenzfläche der SiGe-Schicht beträgt $\varepsilon_{yy} = (1,2 \pm 0,2) \%$. Der Wert ist 15 % geringer als der theoretische Wert. Die Auswertung eines (220)-DF-Hologramms bestätigt, dass in [110]-Richtung keine Deformation vorliegt ($\varepsilon_{xx} = 0$), d.h. die SiGe-Schicht ist tatsächlich pseudomorph auf das Si-Substrat gewachsen (Abb. 6.3). Der Unterschied zwischen Theorie (Bulkwert) und Experiment kann auf eine Relaxation des Deformationszustandes an der SiGe/Si-Grenzfläche in der TEM-Lamelle zurückzuführen sein (DENNEULIN *et al.* 2014). Diese Relaxation ist auch der Grund dafür, dass die Deformation der SiGe-Schicht in Richtung der Grenzfläche zur amorphen Deckschicht aus SiO₂ auf $\varepsilon_{yy} = (0,9 \pm 0,2) \%$ abnimmt. Gleichzeitig sorgt sie dafür, dass in dem Si-Substrat rechts von der SiGe/Si-Grenzfläche eine kompressive Deformation $\varepsilon_{yy} = (-0,2 \pm 0,1) \%$ auftritt. Erst ab einer Tiefe von 70 nm ist das Si-Substrat vollkommen unverspannt ($\varepsilon_{yy} = 0$).

Für Probe II. mit einer SiGe-Schicht mit 25 % Ge-Gehalt erwartet man eine relative Änderung der Gitterkonstanten von SiGe ($a_{\text{SiGe}} = 0,5482$ nm) und Si ($a_{\text{Si}} = a_{\parallel} = 0,5451$ nm) $\varepsilon = 0,95 \%$, woraus sich in [001]-Richtung die Gitterkonstante $a_{\perp} = 0,5516$ nm und eine Gitterdeformation $\varepsilon_{yy} = 1,58 \%$ ergibt. Abbildung 6.4 zeigt die Ergebnisse der DFH-Messung. Zunächst wird ein (004)-DF-Hologramm aufgezeichnet (Abb. 6.4a), aus dem die Phase der (004)-Beugungswelle rekonstruiert wird. Die (004)-Phase zeigt den charakteristischen linearen Phasengradienten in der SiGe-Schicht. Durch Ableiten der (004)-Phase ergibt sich daraus direkt die Karte der [001]-Gitterdeformation ε_{yy} mit einer Lateralauflösung von 8 nm (Abb. 6.4b). Aus dieser bestimmt sich in der SiGe-Schicht $\varepsilon_{yy} = (1,2 \pm 0,1) \%$. Die Abweichung zum theoretischen Wert beträgt hier im Vergleich zu Probe I. sogar 20 %. Obwohl Probe II. eine ähnliche Dicke wie Probe I. besitzt, muss die globale Relaxation der TEM-Lamelle hier stärker sein. Eine Abnahme der Gitterdeformation von der SiGe/Si-Grenzfläche zur Deckschicht lässt sich auch in Probe II. beobachten; hier beträgt $\varepsilon_{yy} = (0,5 \pm 0,1) \%$. Die kompressive

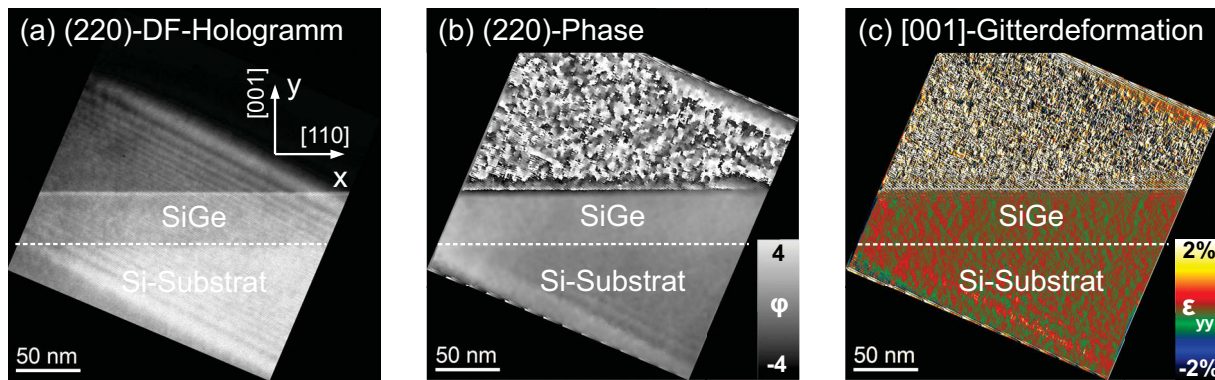


Abbildung 6.3: Gitterdeformation an Si/SiGe-Grenzfläche – Probe I.: a) (220)-DF-Hologramm. b) Rekonstruierte (220)-Phase. c) Abgeleitete [110]-Deformationskarte. SiGe-Schicht und Si-Substrat besitzen die gleiche Gitterkonstante $a_{Si} = a_{||}$ in [110]-Richtung.

Deformation im Si-Substrat unterhalb der SiGe-Schicht ist nur äußerst schwach ausgeprägt und befindet sich in der Größenordnung des Rauschlevels.

In Abschnitt 5.13.1 wurde im Zusammenhang mit Präparationsartefakten durch Curtaining erläutert, dass jede Beugungswelle auch einen Phasenfaktor enthält, welcher den Anteil des mittleren inneren Potentials repräsentiert. Überlagert man in einer Beugungswelle die Teilwellen aus Bereichen gleicher Materialien, verschwindet dieser Phasenfaktor. Bei gleichen Materialien aber starken Variationen der Objektdicke tritt Curtaining auf. Werden bei gleicher Objektdicke zwei Bereiche mit unterschiedlichen Materialien überlagert, so erwartet man eine zusätzliche Phasenschiebung aufgrund der Differenz der mittleren inneren Potentiale (MIP) von SiGe und Si (FORMÁNEK 2005). Diese zusätzliche Phasenschiebung kann, wie in Abschnitt 5.13.1 erläutert, in einem Nullstrahlhologramm separat von dem Anteil der Gitterdeformation aufgezeichnet werden (Abb. 6.4d). Nach dessen Rekonstruktion erhält man die in Abbildung 6.4e gezeigte Phasenverteilung. Die durch den Unterschied der MIP hervorgerufene Phasendifferenz beträgt $\Delta\varphi = 0,3$ rad. Im Si-Substrat wird die Nullstrahlphase auf den Wert Null gesetzt, den gleichen Wert wie die $(00\bar{4})$ -Phase. So kann durch Subtraktion der Nullstrahlphase von der $(00\bar{4})$ -Phase der Anteil des MIP eliminiert werden. Es bleibt einzig der Anteil der Gitterdeformation übrig, aus der sich die in Abbildung 6.4f gezeigte [001]-Deformationskarte ableitet. Ein Vergleich der Linienprofile II. und IV. zeigt allerdings, dass der Effekt des MIP auf die Deformationsmessung gering ist. Denn die zusätzliche Phasenschiebung in der Nullstrahlphase zwischen SiGe-Schicht und Si-Substrat ist klein. Die SiGe-Schicht beschreibt eher ein Plateau, höchstens einen leichten Gradienten zur Deckschicht, der aber viel kleiner ist als der Gradient in der $(00\bar{4})$ -Phase. Dagegen existiert an der SiGe/Si-Grenzfläche ein steiler Gradient, dessen Ausdehnung sich jedoch auf 10 nm um die Grenzfläche beschränkt, und zu der erkennbaren kleinen Änderung des Deformationsprofils an der Grenzfläche führt (Abb. 6.4). Die Deformationsmessung in der SiGe-Schicht wird dadurch nicht beeinflusst. Bei Messungen an Transistorstrukturen kann der Einfluss des MIP auch deshalb vernachlässigt werden, da im allgemeinen nur die Gitterdeformation im Gatekanal interessiert, dieser aber meist aus verspanntem Si besteht, also die Materialien in den zu überlagernden Bereichen identisch sind.

Auffällig sind die starken Schwankungen im Deformationsverlauf in der SiGe-Schicht. Einerseits könnte es sich hierbei schlicht um Rauschen handeln, jedoch sind die Schwankungen in der SiGe-Schicht deutlich größer als das Rauschen im Si-Substrat. Tatsächlich hat die Auswertung der DF-Hologrammserie in Abschnitt 5.10 gezeigt,

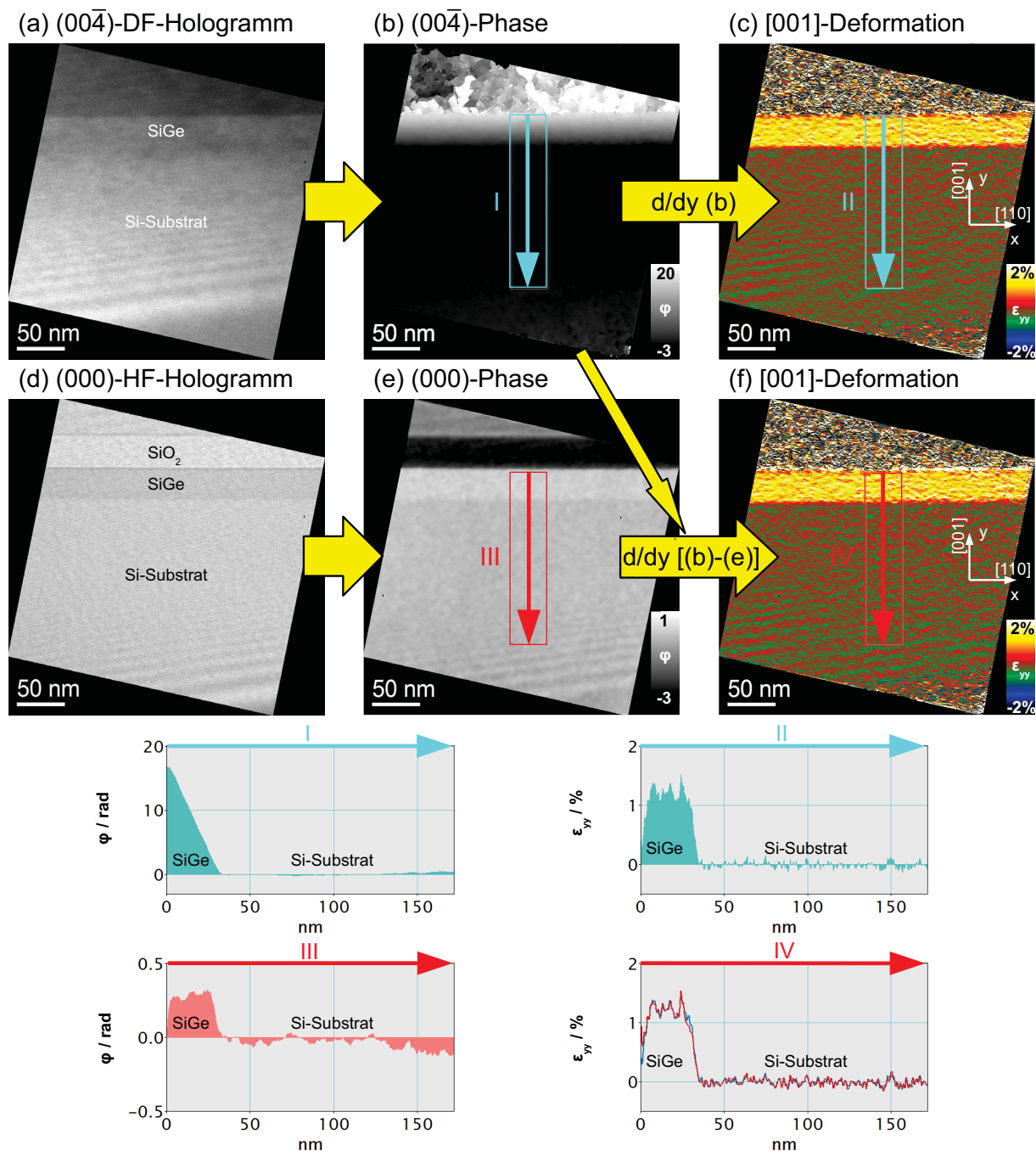


Abbildung 6.4: Gitterdeformation an Si/SiGe-Grenzfläche – Probe II.: a) (004̄)-DF-Hologramm. b) Rekonstruierte (004̄)-Phase der Beugungswelle: Gradient in SiGe-Schicht entspricht Deformation. c) Aus (b) direkt abgeleitete [001]-Deformationskarte. d) Nullstrahlhologramm. e) Rekonstruierte Nullstrahlphase: Plateau in SiGe-Schicht repräsentiert Differenz des mittleren inneren Potentials zw. Si und SiGe. f) Nach Differenzbildung (b)-(e) abgeleitete [001]-Deformationskarte: Kein Unterschied zu (c).

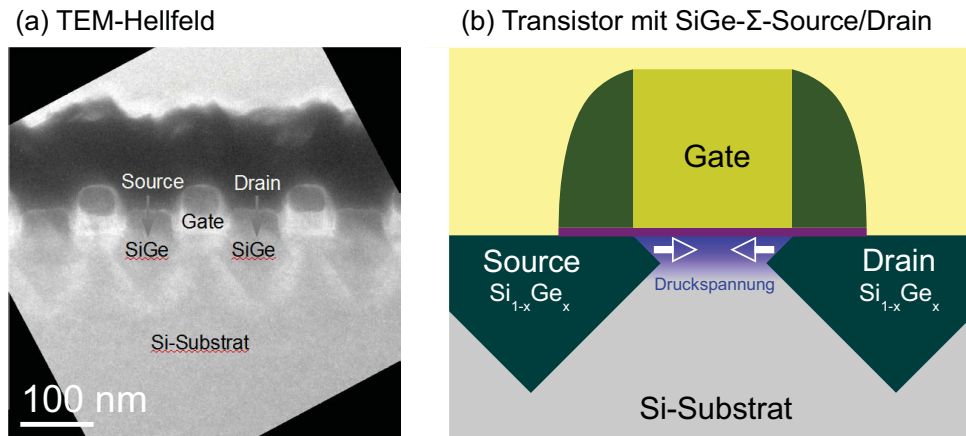


Abbildung 6.5: Transistorstruktur mit SiGe- Σ -Source/Drain-Kontakten auf Bulk-Si: a) TEM-Hellfeldaufnahme der untersuchten Struktur. b) Erzeugung der Druckspannung in [110]-Richtung im Gatekanal.

dass das Rauschen in der SiGe-Schicht durchaus doppelt so groß sein kann wie im Si-Substrat. Andererseits könnte sich hinter den Schwankungen auch Objektinformation verbergen, z.B. könnten Inhomogenitäten in der Ge-Konzentration lokale Änderungen des Deformationszustands bewirken. Tatsächlich treten die größten Schwankungen des Deformationsverlaufs an Stellen auf, an denen auch im Verlauf der Nullstrahlphase Schwankungen auftreten; dabei ist die Nullstrahlphase proportional zum MIP, d.h. zur Ge-Konzentration. Letztlich aber steht zu wenig Information über die Ge-Konzentration oder den Wachstumsprozess zur Verfügung, um die Ursache für die Schwankungen im Deformationsverlauf in der SiGe-Schicht zweifelsfrei klären zu können.

6.2 Mit SiGe verspannte Transistoren auf Bulk-Silizium

6.2.1 Transistorstrukturen mit SiGe- Σ -Source/Drain-Gebieten

Transistoren auf Bulk-Si-Substrat bilden die mit Abstand wichtigste Gruppe von Halbleiterstrukturen. Der Spannungseintrag in den Gatekanal durch SiGe-Source/Drain-Gebiet wurde in Abschnitt 3.2.1 ausführlich erläutert. Abbildung 6.5 zeigt ein Beispiel für eine Transistorstruktur mit SiGe- Σ -Source/Drain-Gebieten. Der Name leitet sich von der Form der SiGe-Source/Drain-Gebiete ab, welche an den griechischen Buchstaben Σ erinnert. Durch Anpassung der Form kann gezielt ein höherer Spannungseintrag im Gatekanal erreicht werden als bei abgerundeten („U-shaped“) SiGe-Source/Drain-Gebieten, die in Abschnitt 6.2.2 betrachtet werden. Die SiGe-Source/Drain-Gebiete erzeugen im Transistorkanal eine kompressive Verspannung in [110]-Richtung. Diese Stauchung versucht das Si-Kristallgitter in [001]-Richtung durch eine Streckung (tensile Verspannung) auszugleichen.

Zur Analyse des Deformationszustands werden DF-Hologramme der (220)- und der (004)-Beugungswelle aufgezeichnet. Die rekonstruierten Phasenverteilungen sowie die resultierenden [110]- und [001]-Deformationskarten sind in Abb. 6.6 und Abb. 6.7 dargestellt. Anhand der Profilschnitte kann der Verlauf der Gitterdeformation im Kanalbereich parallel zum Gate, senkrecht vom Gate ins Si-Substrat und von den SiGe-Bereichen ins Si-Substrat abgelesen werden. In [110]-Richtung stellt man im Transistorkanal eine maximale, kompressive Deformation von $\varepsilon_{xx} = -(2,0 \pm 0,01) \%$ fest (Abb. 6.6 Profil A und B).

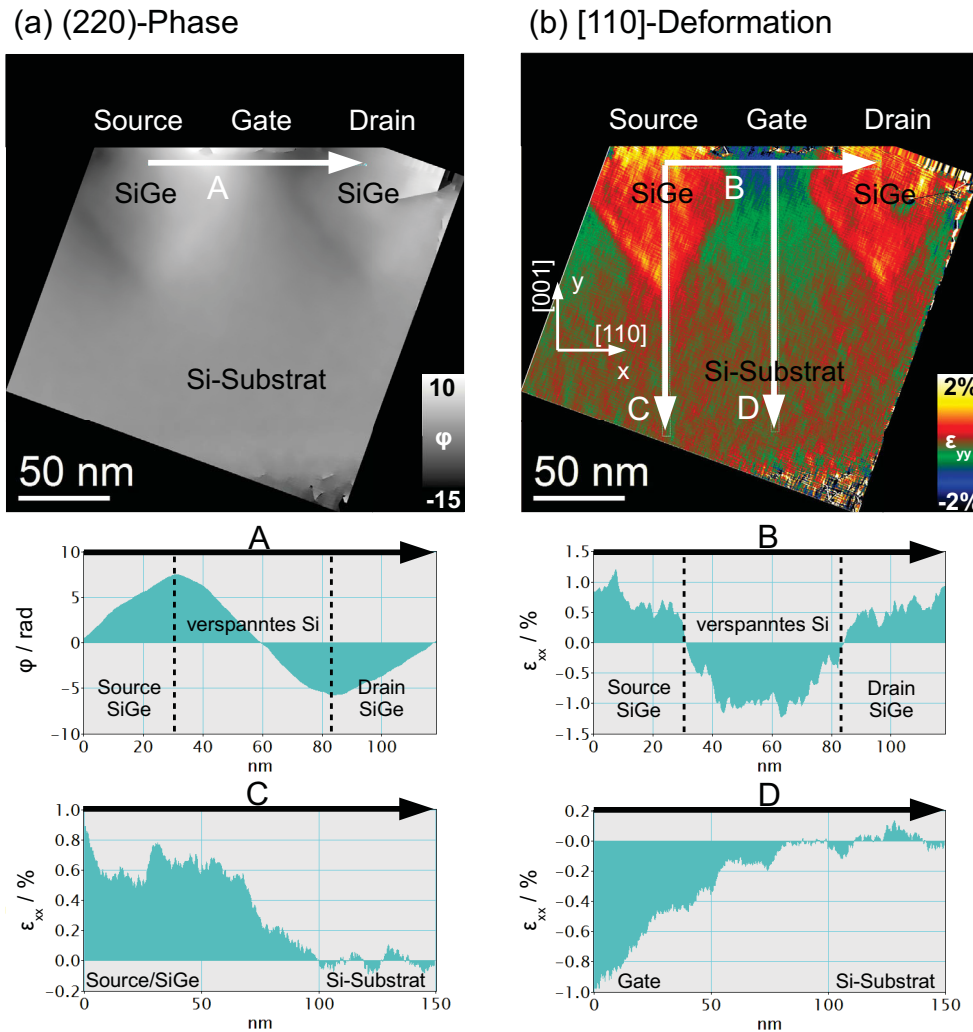


Abbildung 6.6: Verspanntes Si zwischen SiGe- Σ -Source/Drain-Kontakten. Aus (220)-DF-Hologramm rekonstruierte (220)-Phase (a) und daraus abgeleitete [110]-Deformationskarte (b).

In [001]-Richtung beträgt die tensile Deformation des Si an der Grenzfläche zwischen Gate und Transistorkanal $\epsilon_{yy} = +(1,00 \pm 0,01) \%$ und nimmt im Abstand von 5 nm auf $\epsilon_{yy} = +(0,50 \pm 0,01) \%$ ab (Abb. 6.6 Profil D). Profil E senkrecht zu Profil D zeigt den [001]-Deformationsverlauf entlang der [110]-Richtung unterhalb des Gates. An den Rändern des Transistorkanals, im Bereich der SiGe/Si-Grenzflächen an Source und Drain, treten Unstetigkeiten im Phasen- und Deformationsverlauf auf. An diesen Stellen konnten beim *phase unwrapping* der (004)-Phase die Phasensprünge nicht rekonstruiert werden, so dass nach Ableiten der Deformationskarte aus der Phase besagte Unstetigkeiten im Deformationsverlauf zurückbleiben. Bei Vergleich der angesprochenen Stellen im (004)-DF-Hologramm in Abbildung 6.8 stellt man fest, dass dort erstens die Interferenzstreifen teilweise verschwinden, der Streifenkontrast gegen Null tendiert, zweitens auch die Intensität äußerst gering ist. Eine genauere Analyse ermöglicht die aus dem (004)-DF-Hologramm rekonstruierte Amplitude in Abbildung 6.8, die im wesentlichen die Intensität der (004)-Beugungswelle widerspiegelt. An den gekennzeichneten Stellen der SiGe/Si-Grenzflächen an Source und Drain beobachtet man im Vergleich zu den übrigen abgebildeten Objektstellen sehr niedrige Amplitudenwerte.

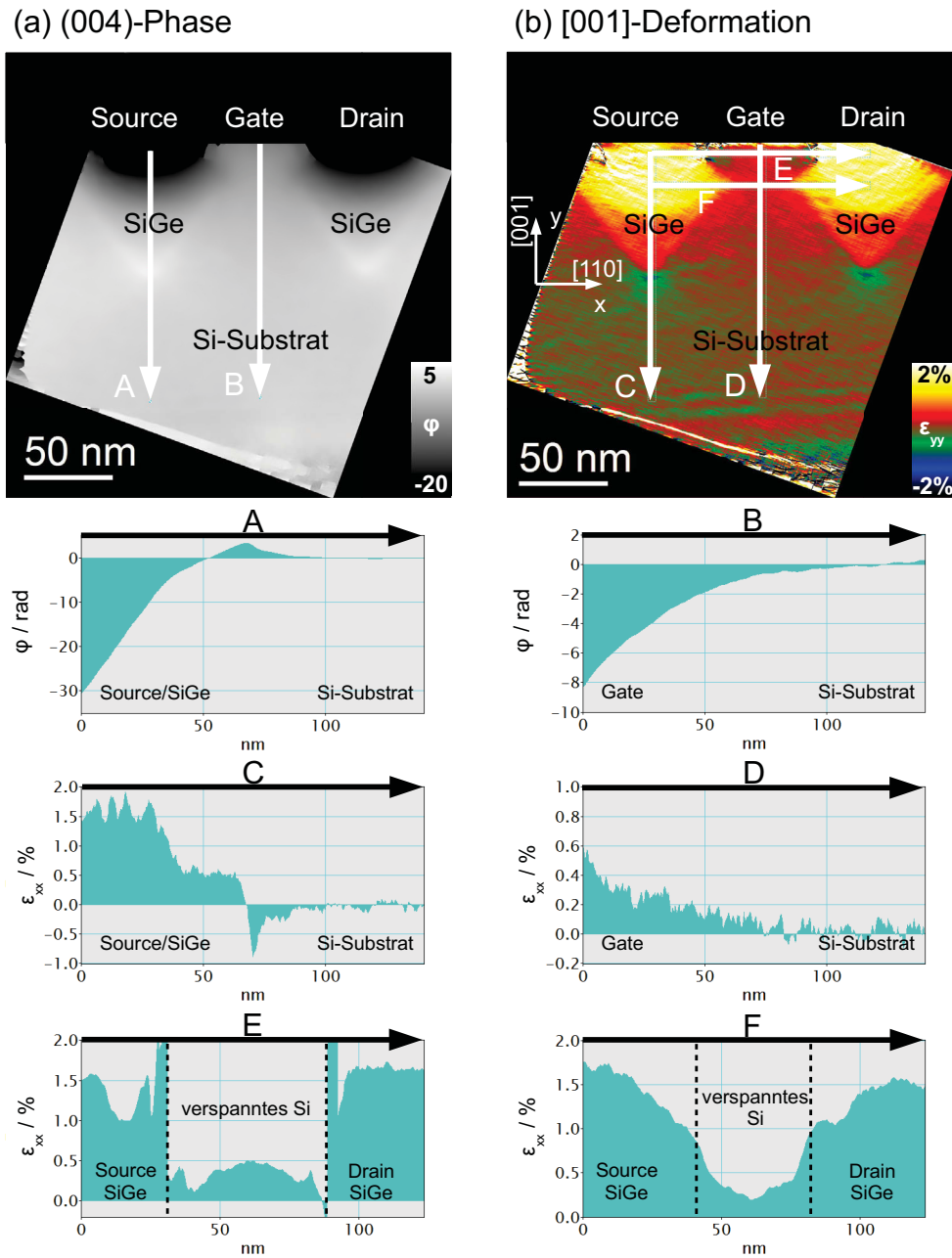


Abbildung 6.7: Verspanntes Si zwischen SiGe- Σ -Source/Drain-Kontakten. Aus (004)-DF-Hologramm rekonstruierte (004)-Phase (a) und daraus abgeleitete [001]-Deformationskarte (b).

Der geringe Streifenkontrast im DF-Hologramm und die niedrigen Amplitudenwerte deuten darauf hin, dass in besagten Bereichen dynamische Beugung auftritt. Dadurch lassen sich Phase und Amplitude der (004)-Beugungswelle an diesen Stellen nicht mehr sauber rekonstruieren. Die dynamischen Effekte konnten auch durch Aufnahme der DF-Hologramme unter veränderten Objektkippungen nicht vermieden werden. Da der zentrale Bereich des Transistorkanals jedoch frei von Artefakten ist, kann dort eine quantitative Auswertung vorgenommen werden; die maximale tensile Deformation im Transistorkanal beträgt $\epsilon_{yy} = (0,50 \pm 0,01)\%$. Profil F zeigt, wie sich die [001]-Deformation in 20 nm Abstand zum Gate auf $\epsilon_{yy} = (0,30 \pm 0,01)\%$ verringert.

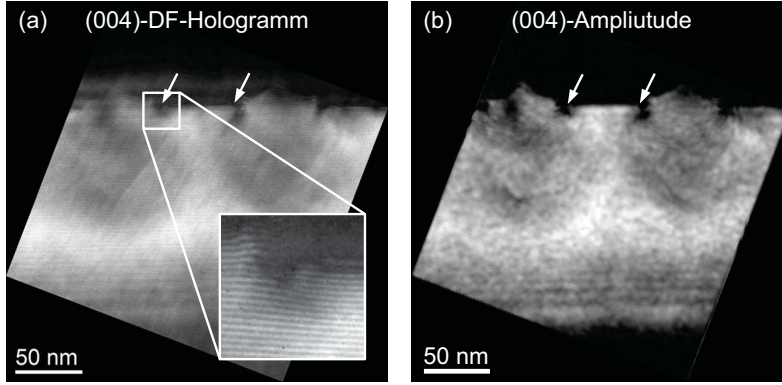


Abbildung 6.8: a) (004)-DF-Hologramm des Transistors mit SiGe- Σ -Source/Drain-Kontakten. Pfeile markieren, wo Streifenkontrast und Intensität verschwinden. b) Rekonstruierte, mittels Leerhologramm normierte Amplitude der (004)-Beugungswelle. Die markierten Bereiche verschwindender Intensität sind ein Indiz für dynamische Beugung in den Ecken von Gatekanal und SiGe/Si-Source/Drain.

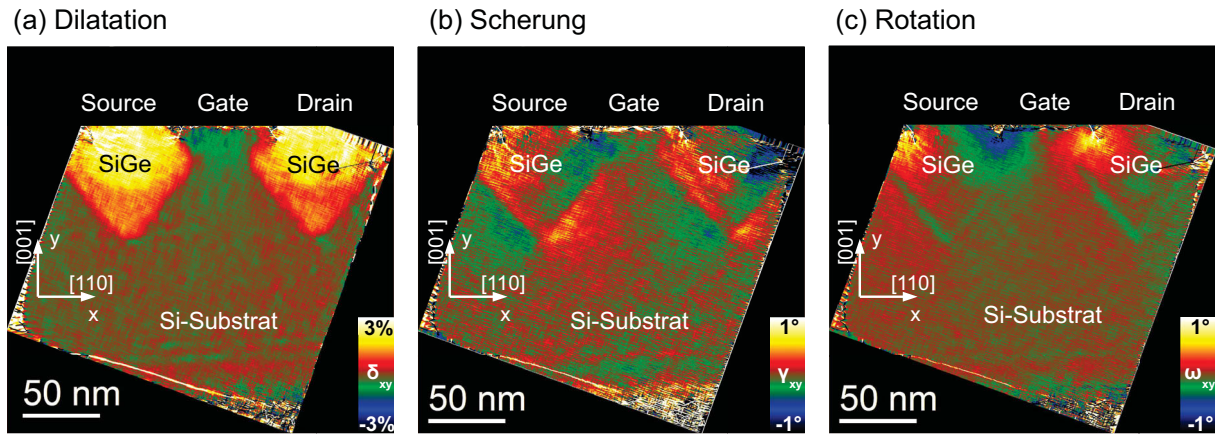


Abbildung 6.9: Weitere aus den Komponenten des Verzerrungstensors abgeleitete Größen: a) Dilatation δ_{xy} , b) Scherung γ_{xy} und c) Rotation ω_{xy} .

Aus den (220)- und (004)-Phasen lässt sich nicht nur Information über die Deformationen ε_{xx} und ε_{yy} ableiten, sondern auch über weitere Größen, wie Dilatation δ_{xy} , Scherung γ_{xy} und Rotation ω_{xy} . Laut Abschnitt 2.1 wird der Deformationszustand durch den dreidimensionalen Verzerrungstensor in Gleichung (2.10) beschrieben. Die DFH erlaubt jedoch ausschließlich, den projizierten Deformationszustand in der (x, y) -Ebene aus (220)- und (004)-Phase zu bestimmen. Somit erhält man Zugang einzig zu den planaren Komponenten des Verzerrungstensors, die sich in Form einer zweidimensionalen Untermatrix

$$\varepsilon_{ij}^{2D} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) = \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} & \varepsilon_{xy} \\ \varepsilon_{yx} & \varepsilon_{yy} \end{pmatrix} \quad (6.7)$$

des dreidimensionalen Verzerrungstensors ausdrücken lassen. Die Deformationen entlang x - und y -Richtung lassen sich wie erläutert aus den Ableitungen von (220)- und (004)-Phase entlang der zugehörigen parallelen Gitterrichtungen [110] und [001] bestimmen:

$$\varepsilon_{xx} = \frac{1}{2\pi g_{220}} \frac{\partial \varphi_{220}}{\partial x}, \quad \varepsilon_{yy} = \frac{1}{2\pi g_{004}} \frac{\partial \varphi_{004}}{\partial y}, \quad (6.8)$$

wobei g_{220} und g_{004} die reziproken (220)- und (004)-Netzebenenabstände bezeichnen.

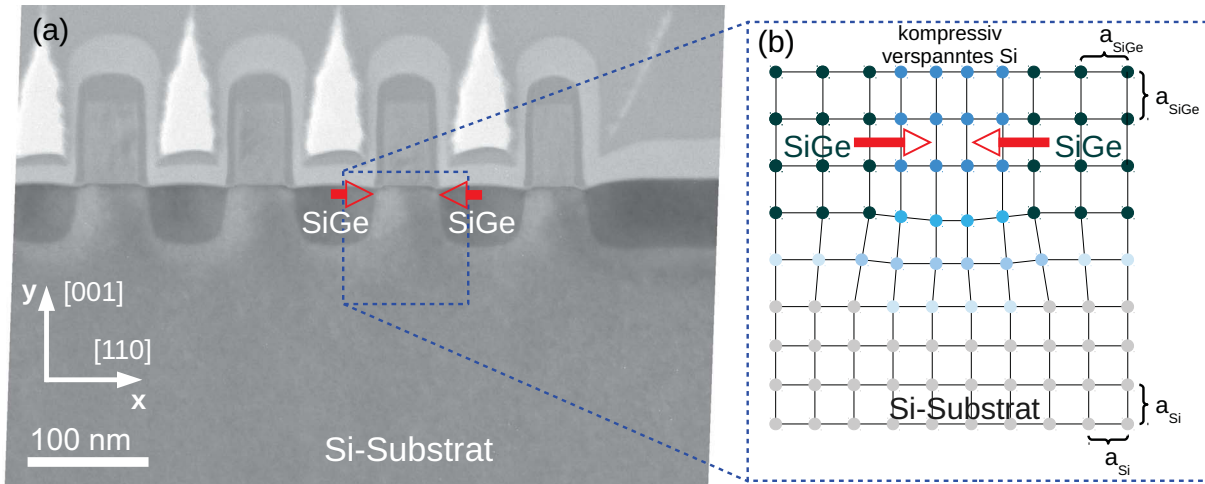


Abbildung 6.10: a) TEM-Hellfeldaufnahme der untersuchten Transistorstruktur mit SiGe-Source/Drain. b) Illustration des Spannungseintrags in den Transistorkanal. SiGe-Gitter eingezwängt in u-förmigen Vertiefungen an Source/Drain übt aufgrund der größeren Gitterkonstante eine Druckspannung auf das Si-Gitter im Kanal aus.

Die Dilatation (in 3D die relative Volumenänderung) ergibt sich aus der Spur des Verzerrungstensors:

$$\delta_{xy} = \varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy}. \quad (6.9)$$

Die Nebendiagonalelemente des Verzerrungstensors (6.7) beinhalten laut Abschnitt 2.1 Informationen über Scherung und Rotation in der (x, y) -Ebene. Dazu werden (220)- und (004)-Phase entlang der zu den Netzebenen senkrechten Gitterrichtungen [001] und [110] abgeleitet. So erhält man die Scherung:

$$\gamma_{xy} = \frac{1}{2} (\varepsilon_{xy} + \varepsilon_{yx}) = \frac{1}{4\pi} \left(\frac{1}{g_{220}} \frac{\partial \varphi_{220}}{\partial y} + \frac{1}{g_{004}} \frac{\partial \varphi_{004}}{\partial x} \right), \quad (6.10)$$

sowie die Rotation:

$$\omega_{xy} = \frac{1}{2} (\varepsilon_{yx} - \varepsilon_{xy}) = \frac{1}{4\pi} \left(\frac{1}{g_{004}} \frac{\partial \varphi_{004}}{\partial x} - \frac{1}{g_{220}} \frac{\partial \varphi_{220}}{\partial y} \right). \quad (6.11)$$

Abbildung 6.9 zeigt Dilatations-, Scherungs- und Rotationskarte der untersuchten Transistorstruktur. Sie sind für die Halbleiterindustrie nur von geringem Interesse, da sie für die Abschätzung der mechanischen Spannungen im Transistorkanal mit dem Hooke'schen Gesetz (Abschnitt 2.3) nicht benötigt werden. Dennoch demonstriert das hier gezeigte Beispiel eindrucksvoll, wie die DFH ermöglicht, den planaren Deformationszustand in einer Transistorstruktur vollständig zu bestimmen.

6.2.2 Vergleich von Dunkelfeldholographie und Nanobeugung

Um Zuverlässigkeit und Messgenauigkeit der DFH bewerten zu können, wird sie mit der Nanobeugung (*nano beam diffraction*, NBD) als eine komplementäre Methode (Usuda *et al.* 2005) verglichen. Als Testobjekt dient die in Abbildung 6.10 gezeigte pMOS-Transistorstruktur mit ins Si-Substrat eingebetteten SiGe-Source/Drain-Kontakten, welche eine Druckspannung im Gatekanal erzeugen. Mittels FIB wurde eine Probe mit 150 nm Dicke für DFH und 250 nm Dicke für NBD angefertigt; auf beiden Proben werden identische Objektstellen untersucht.

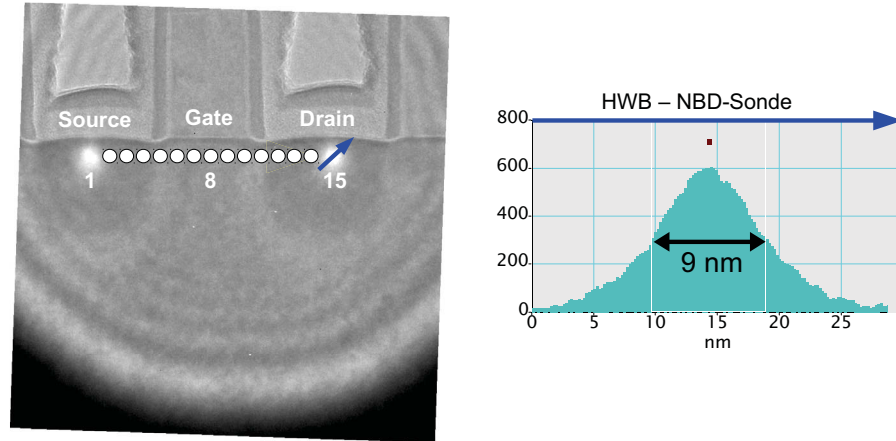
Die NBD-Messung erfolgt an einem *FEI Tecnai F30* TEM im *Center for Complex Analysis* bei *GLOBALFOUNDRIES* (ENGELMANN *et al.* 2006). Für NBD wird der Elektronenstrahl mittels einer 10 μm breiten C2-Blende in der zweiten Kondensorlinse und eines besonders geringen Konvergenzwinkels von 0,5 mrad zu einer schmalen Elektronensonde geformt; der Elektronenstrahl stellt somit ein schmales, nahezu paralleles Bündel dar. Der Sondendurchmesser wird durch die Halbwertsbreite des in Abbildung 6.11b gezeigten Intensitätsprofil des Elektronenstrahls auf der Probenoberfläche definiert (hier 9 nm) und ist zugleich ein Maß für die Lateralauflösung. Als kleinster erzielbare Sondendurchmesser konnte 6,5 nm realisiert werden. Der Elektronenstrahl wird entlang des Gatekanals von Source nach Drain und senkrecht dazu vom Gatekanal ins Substrat über die Probe gerastert. Der Abstand der Rasterpunkte beträgt ca. 12 nm. Abbildung 6.11a illustriert die Rasterung des Gatekanals. Die kreisförmig verlaufenden Fresnelschen Beugungssäume entstehen durch Fresnelbeugung an der bzgl. der Objektebene defokussierten C2-Blende, die bei der Aufnahme im Beleuchtungsstrahlengang belassen wurde. Die zwischen erstem und letztem Rasterpunkt markierten Punkte wurden zu Illustrationszwecken nachträglich eingezeichnet. An jedem dieser Rasterpunkte wird ein Nanobeugungsbild aufgezeichnet. Darin werden die Beugungsreflexe durch Gaussfunktionen approximiert, deren Schwerpunkt die Position des Beugungsreflexes definiert. Um die Deformation entlang der Richtung von g_{ref} zu bestimmen, wird der Abstand $2g_{roi} = 2/d_{roi}$ zwischen den zwei zugehörigen Beugungsreflexen im verspannten Si subpixel genau vermessen. Abbildung 6.11c illustriert das Vorgehen am Beispiel der $\langle 440 \rangle$ -Beugungsreflexe. Über einen Referenzscan im Si-Substrat wird anschließend der Abstand $2g_{ref} = 2/d_{ref}$ im unverspannten Si nach gleichem Prinzip bestimmt (Abb. 6.11d). Aus der Differenz der Reflexabstände lässt sich schließlich die Deformation in Richtung von g_{ref} für jeden Rasterpunkt bestimmen:

$$\varepsilon_{gg} = \frac{d_{roi} - d_{ref}}{d_{ref}} = \frac{g_{ref} - g_{roi}}{g_{roi}}. \quad (6.12)$$

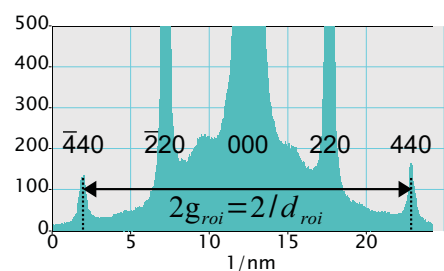
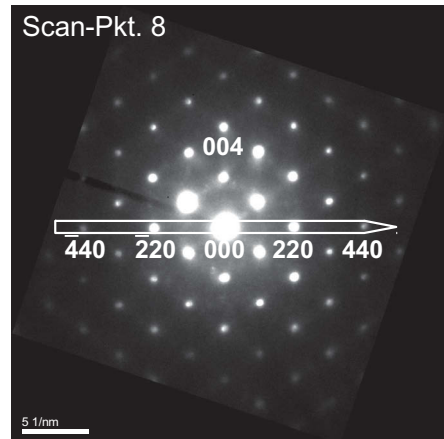
Aus der Gesamtheit der Rasterpunkte ergibt sich letztlich der Deformationsverlauf ε_{gg} in der Probe entlang des abgerasterten Profils.

Die DFH-Messung erfolgt im *Speziallabor Trieben* am *FEI Tecnai F20* TEM. Dabei wird je ein (220)-DF-Hologramm mit einem Gesichtsfeld $FOV = 800 \text{ nm}$ und ein weiteres mit $FOV = 200 \text{ nm}$ aufgezeichnet (Abb. 6.12a und 6.12b), wobei die in Abschnitt 5.3.3 erläuterten Abbildungsstrahlengänge benutzt werden. Anschließend erfolgt die Rekonstruktion der (220)-Phasen, aus denen die in Abb. 6.12c und 6.12d gezeigten Karten der [110]-Deformation abgeleitet werden. Bei dem größeren Gesichtsfeld erreicht die Lateralauflösung $1/q_{res} = 10 \text{ nm}$, während sie bei dem kleineren Gesichtsfeld $1/q_{res} = 4 \text{ nm}$ beträgt. Das größere Gesichtsfeld ermöglicht, die Deformationsverteilungen an vier Transistoren A, B, C und D aus einem einzigen DF-Hologramm gleichzeitig zu erhalten. Dagegen kann mit dem kleineren Gesichtsfeld nur die Deformationsverteilung im Gatekanal eines einzelnen Transistors (hier z.B. C) mit besserer Lateralauflösung vermessen werden. Linienprofile an Transistor B und C zeigen den [110]-Deformationsverlauf in x -Richtung im Gatekanal und in y -Richtung vom Gate ins undeformierte Si-Substrat. An diesen Transistoren werden die vergleichenden NBD-Messungen vorgenommen. Daher sind in den Linienprofilen der DFH-Messung zusätzlich die Punkte der NBD-Messung eingetragen. Die Linienprofile vom Gate ins Si-Substrat an Transistor B und C zeigen eine hervorragende Übereinstimmung zwischen DFH und NBD. Die Streuung der NBD-Messpunkte erfolgt gleichmäßig um das Deformationsprofil der DFH-Messung; dabei wird die Verteilung

(a) Hellfeld-TEM, Messpunkte des NBD-Scan



(b) Nanobeugungsmuster – versp. Si



(c) Nanobeugungsmuster – unversp. Si

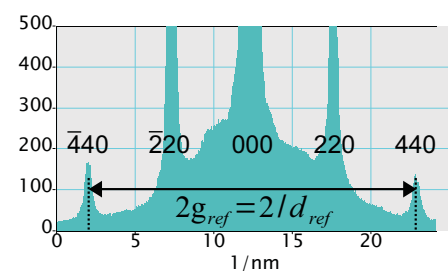
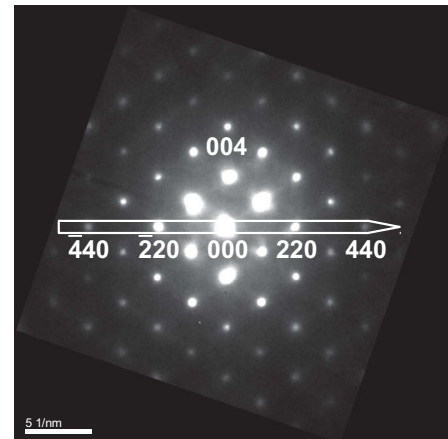


Abbildung 6.11: Prinzip einer NBD-Messung: a) TEM-Hellfeldaufnahme mit den nachträglich eingetragenen Messpunkten des NBD-Scans. Die Fresnelbeugungssäume entstehen durch defokussierte Abbildung der Beugungsblende. b) Halbwertsbreite der NBD-Sonde als Maß für die Lateralauflösung. c) Nanobeugungsbild des 8. Messpunktes des NBD-Scans im Transistorkanal. d) Nanobeugungsbild des NBD-Referenz-Scans im unverspannten Si-Substrat. Aus Vergleich des Abstandes der $\{440\}$ -Beugungsreflexe g_{roi} in c) und g_{ref} in d) erfolgt die Bestimmung der $[110]$ -Gitterdeformation. (NBD-Messung und Aufnahmen zur Verfügung gestellt von Dr. Holm Geisler, Center for Complex Analysis, GLOBALFOUNDRIES, Dresden.)

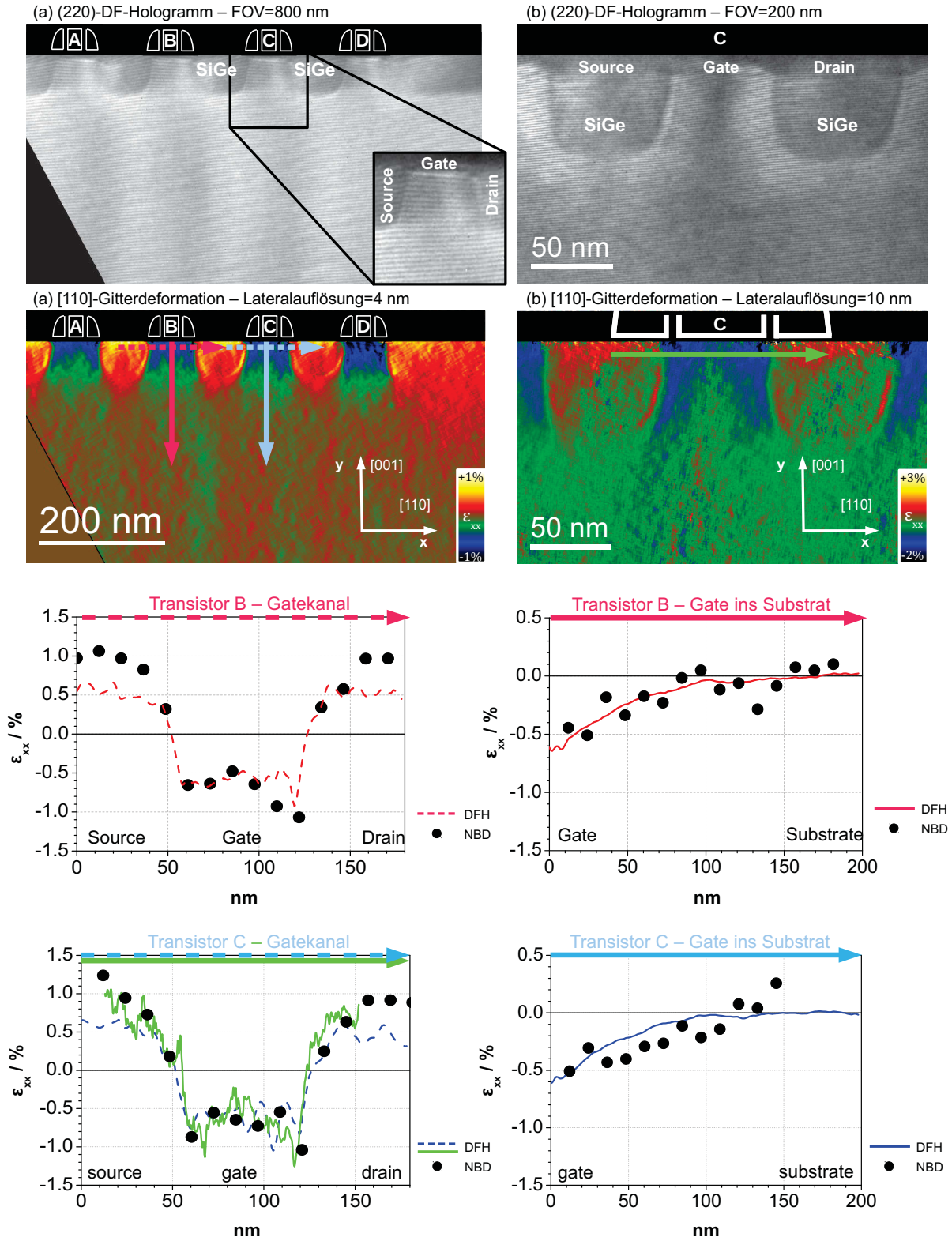


Abbildung 6.12: (220)-DF-Hologramm mit a) $FOV = 800$ nm und b) $FOV = 200$ nm Gesichtsfeld. Daraus rekonstruierte [110]-Deformationskarte mit c) $1/q_{res} = 10$ nm und d) $1/q_{res} = 4$ nm Lateralauflösung. An Transistor B und C werden der [110]-Deformationskarte entnommene Profile im Gatekanal und ins Substrat mit NBD-Scans verglichen.

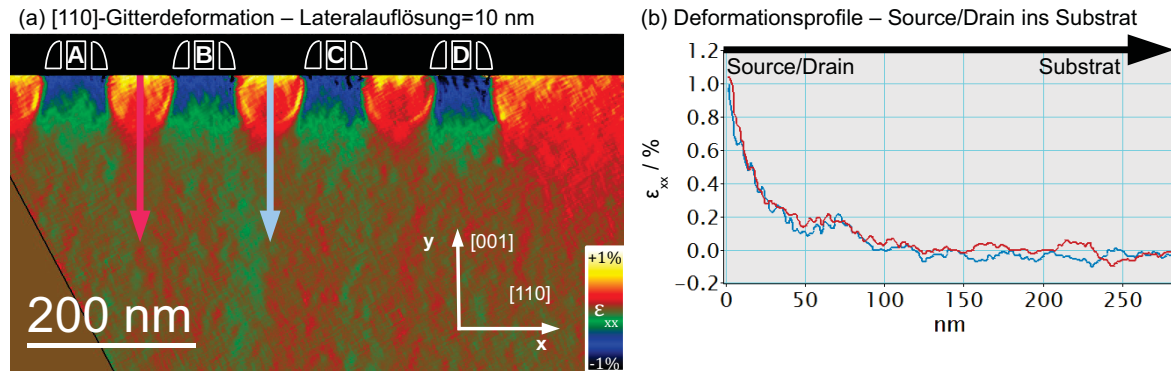


Abbildung 6.13: a) Rekonstruierte [110]-Deformationskarte mit $1/q_{res} = 10$ nm Auflösung und $FOV = 800$ nm Gesichtsfeld. b) Deformationsprofile von Source/Drain ins Si-Substrat an Transistor B und C.

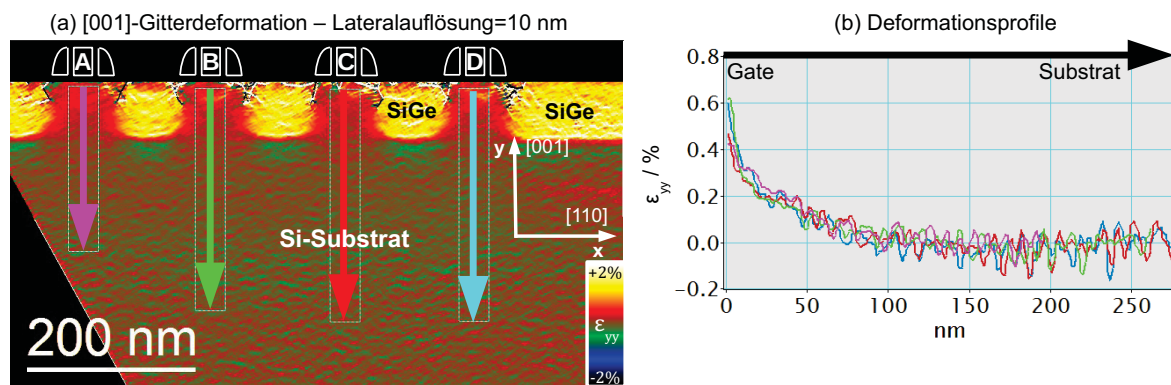


Abbildung 6.14: a) Rekonstruierte [001]-Deformationskarte mit $1/q_{res} = 10$ nm Auflösung und $FOV = 800$ nm Gesichtsfeld. b) Deformationsprofile vom Gatekanal ins Si-Substrat an Transistor B und C.

der NBD-Messpunkte durch das Deformationsprofil der DFH-Messung nahezu perfekt approximiert. Die Linienprofile von Source zu Drain zeigen ebenfalls konsistente Ergebnisse. Im Gatekanal folgt der Deformationsverlauf der DFH-Messung eindeutig dem Verlauf der NBD-Messpunkte. Dabei ist auffällig, dass beide Methoden unabhängig voneinander an der Grenzfläche zwischen Source/Drain und Kanal eine stärkere Kompression mit $\epsilon_{xx} \approx -1,0\%$ messen als im Zentrum des Gatekanals mit $\epsilon_{xx} \approx -0,6\%$. Somit handelt es sich hierbei nicht um einen Artefakt der Messung, sondern um reale Deformationsinformation. Vermutlich ist aufgrund der Gitterfehlانpassung zwischen SiGe an Source/Drain und dem Si im Kanal die kompressive Deformation an der Grenzfläche stärker als im Zentrum des Kanals. Entscheidend für die Beweglichkeit der Elektronen bleibt jedoch die Deformation im Zentrum des Gatekanals. Auch in den Source/Drain-Bereichen stimmen DFH- und NBD-Messung überein. Dies gilt insbesondere für die DFH-Messung mit $FOV = 200$ nm Gesichtsfeld, wobei das Deformationsprofil in 5 nm Abstand zum Gateoxid aufgezeichnet und dabei über die Breite von 12 Pixel gemittelt wird, um das Rauschen zu dämpfen. Bei der DFH-Messung mit $FOV = 800$ nm Gesichtsfeld liest man an Source/Drain eine tensile Deformation $\epsilon_{xx} \approx +(0,6 \pm 0,05)\%$ ab, während in der NBD-Messung Werte um $\epsilon_{xx} \approx +(1,0 \pm 0,1)\%$ erreicht werden. Dabei muss jedoch berücksichtigt werden, dass die Linienprofile über 4 CCD-Pixel gemittelt und in ca. 10 nm Abstand zum Gateoxid aufgezeichnet wurden. Zieht man die in Abbildung 6.13 gezeigten Deformationsprofile von Source/Drain ins Si-Substrat an Transistor B und C hinzu, ergibt sich ein konsistentes Bild. Das Maximum der tensilen

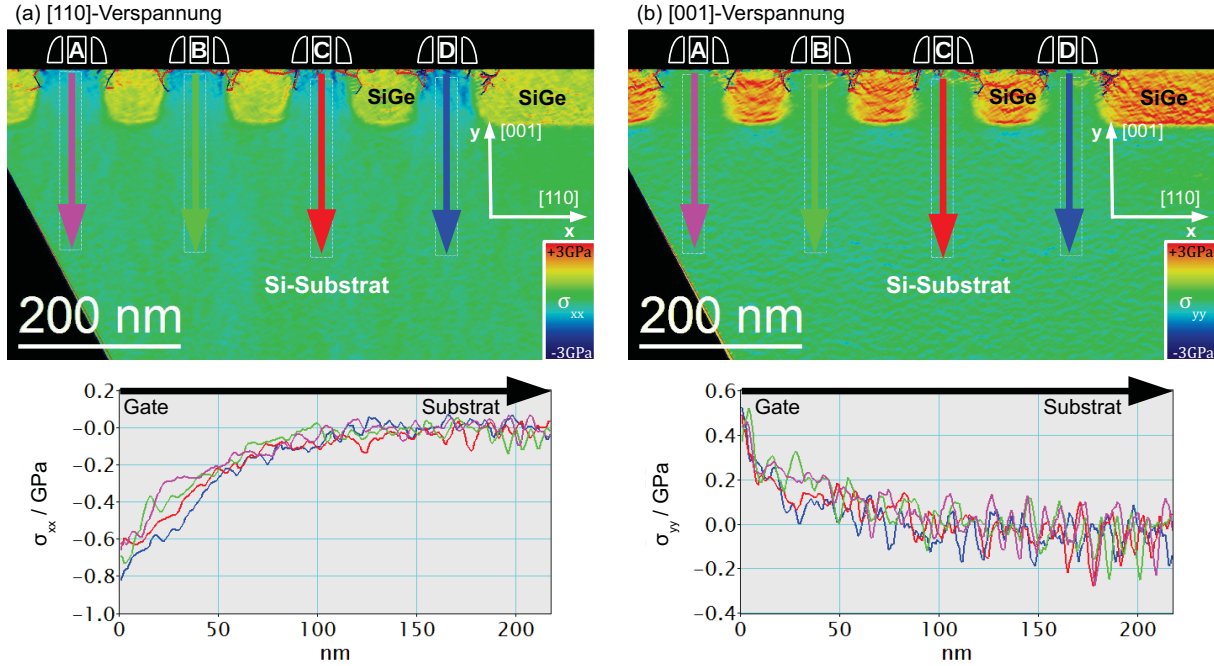


Abbildung 6.15: Karte der mechanischen Verspannung bezüglich a) [110]- und b) [001]-Gitterrichtung.

Deformation an Source/Drain wird an der Grenzfläche zu den Deckschichten erreicht und beträgt $\varepsilon_{xx} = +(1,0 \pm 0,1) \%$. In 10 nm Tiefe sinkt dieser Wert in Übereinstimmung mit den senkrechten Profilen von Source nach Drain auf $\varepsilon_{xx} = +(0,7 \pm 0,05) \%$.

DFH und NBD liefern in diesem Beispiel in sich stimmige Ergebnisse für die Bestimmung der [110]-Gitterdeformation im Gatekanal. Dabei stellt die NBD eine etablierte Methode für die Fehleranalyse bei GLOBALFOUNDRIES dar. Ihre Zuverlässigkeit wurde und wird durch unzählige Spannungsmessungen an verschiedenen Halbleiterstrukturen bestätigt (BÉCHÉ *et al.* 2010, 2013; COOPER *et al.* 2011). Wenn nun die DFH zur NBD äquivalente Ergebnisse liefert, ist dies ein Beweis dafür, dass auch die DFH eine genauso zuverlässige Methode zur Spannungsmessung darstellt. Dabei besitzt die DFH gegenüber der NBD den Vorteil, aus nur zwei DF-Hologrammen (220) und (004) die [110]- und [001]-Gitterdeformation in Form von zweidimensionalen Deformationskarten zu rekonstruieren. Darüber hinaus erlauben die Deformationskarten, kontinuierliche Deformationsverläufe in verschiedenste Richtungen zu betrachten. Der experimentelle Aufbau der DFH, die Aufnahme und die Rekonstruktion eines DFH sind jedoch komplexer als die Aufnahme und Auswertung von Beugungsbildern. Dagegen erlaubt NBD nur die Aufzeichnung von Deformationsprofilen entlang der gerasterten Richtung. Dabei kann aus jedem Beugungsbild eine Information über die Deformation all jener Kristallrichtungen gewonnen werden, deren Beugungsreflexe im Beugungsbild abgebildet sind. In der DFH müsste dazu für jede der Richtungen ein DF-Hologramm der entsprechenden Beugungswelle aufgezeichnet werden.

Der Vollständigkeit halber zeigt Abbildung 6.14 die Ergebnisse für die Messung der [001]-Gitterdeformation an der untersuchten Transistorstruktur. Im Gatekanal lässt sich eine tensile Deformation $\varepsilon_{yy} = +(0,5 \pm 0,1) \%$ nachweisen. Daten für eine vergleichende NBD-Messung liegen für diese Kristallrichtung nicht vor.

Mit Hilfe des Hooke'schen Gesetzes in Abschnitt 2.3 kann aus den Deformationen ε_{xx} und ε_{yy}

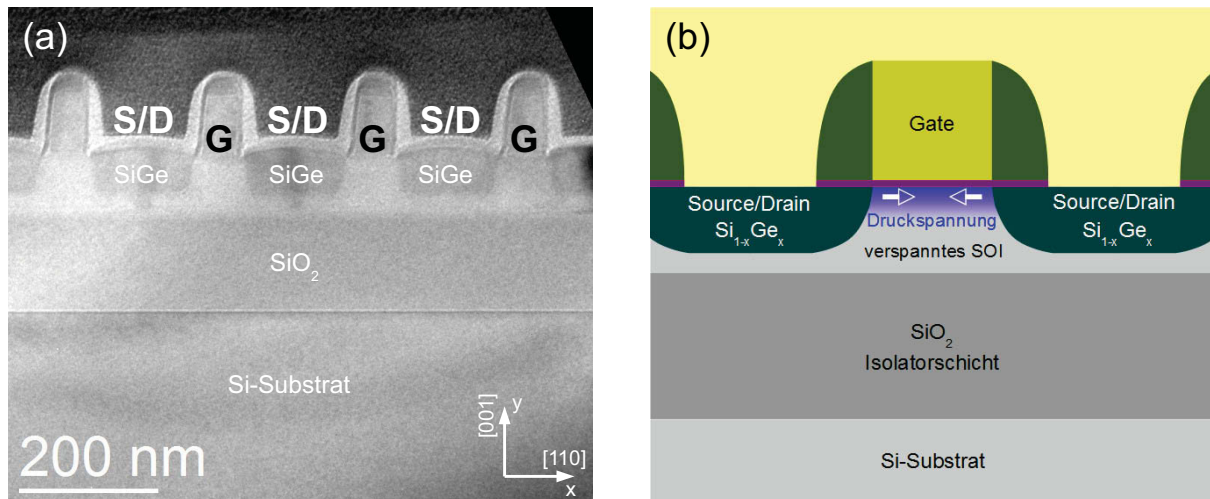


Abbildung 6.16: a) Hellfeld TEM-Aufnahme einer mit SiGe-Source/Drain verspannten Transistorstruktur auf SOI. b) Schematische Darstellung des Spannungseintrags in der untersuchten Struktur.

der Verspannungszustand in der (x, y) -Ebene berechnet werden mit

$$\sigma_{xx} = c_{11}\varepsilon_{xx} + c_{12}\varepsilon_{yy} \quad \text{und} \quad \sigma_{yy} = c_{12}\varepsilon_{xx} + c_{11}\varepsilon_{yy}. \quad (6.13)$$

Die elastischen Konstanten c_{11} und c_{12} können Tabelle 2.1 in Abschnitt 2.3 entnommen werden. Abbildung 6.15 zeigt die resultierenden Verspannungskarten. Anhand der Linienprofile vom Gate ins Si-Substrat kann die mechanische Spannung im Transistorkanal abgelesen werden: In $[110]$ -Richtung stellt man eine Druckspannung von $\sigma_{xx} = -(0,8 \pm 0,1)$ GPa fest. Dagegen liegt in $[001]$ -Richtung eine Zugspannung von $\sigma_{yy} = +(0,5 \pm 0,1)$ GPa vor. Dabei werden die Linienprofile über die Gatebreite von 65 nm gemittelt, um das Signalrauschen zu minimieren. Für die Halbleiterindustrie ist es nun möglich, aus den mittels DFH bestimmten Verspannungen σ_{xx} und σ_{yy} mit Hilfe des piezoresistiven Tensor in Abschnitt 3.3 Ladungsträgerbeweglichkeiten entlang $[110]$ - und $[001]$ -Richtung abzuschätzen.

Man sollte in Erinnerung behalten, dass es sich hierbei nur um eine Approximation für einen zweidimensionalen Verspannungszustand in der (x, y) -Ebene handelt. Denn um aus dem Hooke'schen Gesetz den dreidimensionalen Verspannungszustand vollständig bestimmen zu können, benötigt man Information über die Deformation ε_{zz} in z -Richtung, welche die DFH aufgrund der Projektion entlang der z -Richtung so nicht liefern kann. Einzig für den Fall, dass bei der Deformation keine Volumenänderung auftritt, d.h. die Dilatation bzw. die Spur des Deformationstensors eins ergibt, kann aus ε_{xx} und ε_{yy} die Komponente ε_{zz} berechnet werden.

6.3 Mit SiGe verspannte Transistoren auf Silicon-on-Insulator (SOI)

Die in diesem Abschnitt untersuchte Transistorstruktur verwendet die SOI-Technik (Silicon-on-Insulator). Hierbei werden die elektronischen Bauelemente in eine dünne, einkristalline Siliziumschicht prozessiert, die durch spezielle Herstellungsverfahren auf einem isolierenden Substrat als mechanischem Träger erzeugt wird. Die SOI-Technik erlaubt höhere Packungsdichten, sowie geringere parasitäre Kapazitäten, wodurch die dynamischen Eigenschaften, wie die Schaltfrequenz, verbessert werden.

Abbildung 6.16a zeigt eine Hellfeld-TEM-Aufnahme der untersuchten Transistorstruktur

mit 65 nm-Strukturbreite. Abbildung 6.16b illustriert den Spannungseintrag in den Transistorkanal. Die Transistoren werden auf einer 100 nm dicken SOI-Schicht realisiert, welche durch eine 150 nm dicke, amorphe Siliziumdioxidschicht vom Si-Substrat elektrisch isoliert ist. Mittels „U“-förmiger SiGe-Bereiche an Source und Drain wird eine Druckspannung entlang der [110]-Gitterrichtung im Transistorkanal der p-MOSFET-Struktur erzeugt.

Zur Auswertung der [110]-Gitterdeformation werden die $(2\bar{2}0)$ -Beugungswellen aus der verspannten SOI-Schicht mit denen des unverspannten Si-Substrats überlagert. Da hierzu die 150 nm dicke Isolationsschicht überwunden werden muss, wird eine Hologrammbreite $w_{hol} = 800$ nm benutzt; die Lateralauflösung ist somit auf ca. $1/q_{res} = 8$ nm beschränkt (Abschnitt 5.3.3). Abbildung zeigt das $(2\bar{2}0)$ -DF-Hologramm, die rekonstruierte Phase, sowie die abgeleitete [110]-Deformationskarte. Bei der Aufzeichnung der DF-Hologramm besteht die größte Herausforderung darin, die Probe so in den Zweistrahlfall zu verkippen, dass eine hohe Intensität gleichzeitig in der dünnen SOI-Schicht und im Si-Substrat erzielt wird (Abb. 6.17a). Im Spektrum des Hologramms lässt sich im Seitenband eine Aufspaltung des Reflexes in zwei Anteile beobachten (Abb. 6.17b). Mit Hilfe von Fourierfilterung lassen sich die Anteile jeweils einzeln rekonstruieren, so dass sie entweder der $(2\bar{2}0)$ -Beugungswelle des SOI oder des Si-Substrats zugeordnet werden können. Die vorliegende Reflexaufspaltung liefert einen ersten Hinweis darauf, dass das Kristallgitter des Si-Substrats leicht gegenüber dem Kristallgitter des SOI rotiert sein könnte.

In der Phase der $(2\bar{2}0)$ -Beugungswelle beobachtet man die Auswirkungen der Reflexaufspaltung (Abb. 6.17e). Das Profil der rekonstruierten Phase im SOI zeigt einen starken Phasenkeil entlang der [110]-Richtung, der durch einen zick-zack-förmigen Verlauf linearer Anstiege überlagert wird. Die Phase im Si-Substrat besitzt einen flachen Verlauf. Der zick-zack-förmige Verlauf linearer Anstiege kann verstanden werden als Aneinanderreihung der Linienprofile eines einzelnen Transistors. Der Phasenkeil ist eine Folge der Zentrierung der Maske im Seitenband, mit welcher die Beugungswelle aus dem Spektrum (Abb. 6.17c) isoliert wird. Im vorliegenden Fall wurde die Maske auf den Reflexanteil des Si-Substrats, den Anteil des Referenzkristalls zentriert; dadurch ergibt sich nach der Rekonstruktion ein Phasenkeil im SOI. Erfolgt eine Zentrierung der Maske auf den Reflexanteil des SOI, erhält man den gleichen Phasenkeil dagegen im Si-Substrat.

Die Auswertung der Gitterdeformation erfolgt für jeden Transistor entlang eines Linienprofils vom Gate über das SOI bis in das Si-Substrat. In der [110]-Deformationskarte beobachtet man an allen Transistoren identische Linienprofile, d.h. es liegen keine Prozessierungsfehler vor. Im Gatekanal misst man eine kompressive Deformation von $\varepsilon_{xx} = -(0,50 \pm 0,05) \%$, an der SOI-Unterkante eine tensile Deformation $\varepsilon_{xx} = -(0,20 \pm 0,05) \%$. Nanobeugungsmessungen an vergleichbaren SOI-Strukturen belegen jedoch, dass an der SOI-Unterkante keine Deformation existiert. Im vorliegenden Fall wird das Si-Substrat als Referenz verwendet, d.h. bei der Rekonstruktion wird die Rekonstruktionsmaske auf den Si-Reflexanteil des Seitenbands zentriert. Zentriert man die Rekonstruktionsmaske jedoch auf den Reflexanteil des SOI, so wird das Deformationsprofil in Abbildung 6.17c horizontal um $\Delta\varepsilon_{xx} = -0.2 \%$ derart verschoben, dass der Deformationswert an der SOI-Unterkante $\varepsilon_{xx} = 0 \%$ annimmt. Entsprechend misst man im Gatekanal $\varepsilon_{xx} = (-0,7 \pm 0,1) \%$, im Si-Substrat jedoch $\varepsilon_{xx} = (-0,2 \pm 0,1) \%$. Der „off-set“ zwischen SOI-Unterkante und Si-Substrat könnte somit eine Folge der unterschiedlichen Orientierung von SOI und Si-Substrat sein.

Um zu klären, ob der Deformationsunterschied auf eine Rotation zwischen SOI und Si-Substrat zurückzuführen ist, wird ein weiteres Experiment durchgeführt. Dazu werden von der SOI-Struktur an identischer Objektstelle ein (220) - und (004) -DF-Hologramm

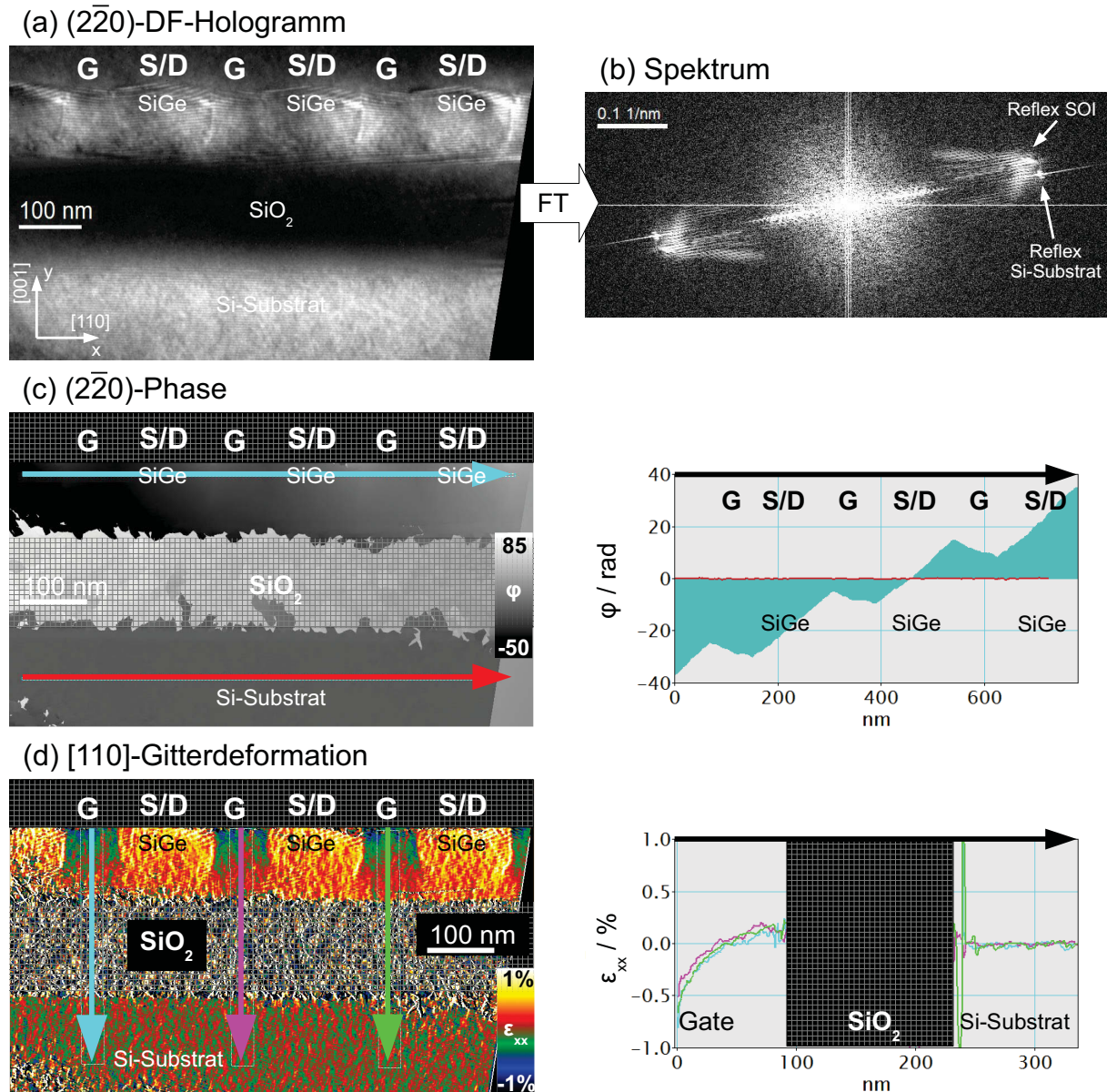


Abbildung 6.17: a) $(2\bar{2}0)$ -DF-Hologramm einer SOI-Struktur. b) Spektrum des DF-Hologramms mit Reflexaufspaltung von SOI und Si-Substrat im Seitenband. c) Rekonstruierte $(2\bar{2}0)$ -Phase: Charakteristischer Zickzack-Verlauf zw. Source, Gate u. Drain wird von einem globalen Phasenkeil überlagert. d) $[110]$ -Deformationskarte: $(-0,5 \pm 0,1) \%$ kompressive Deformation unterhalb des Gatekontakts und $(-0,2 \pm 0,1) \%$ tensile Deformation oberhalb der Si/Isolator-Grenzfläche.

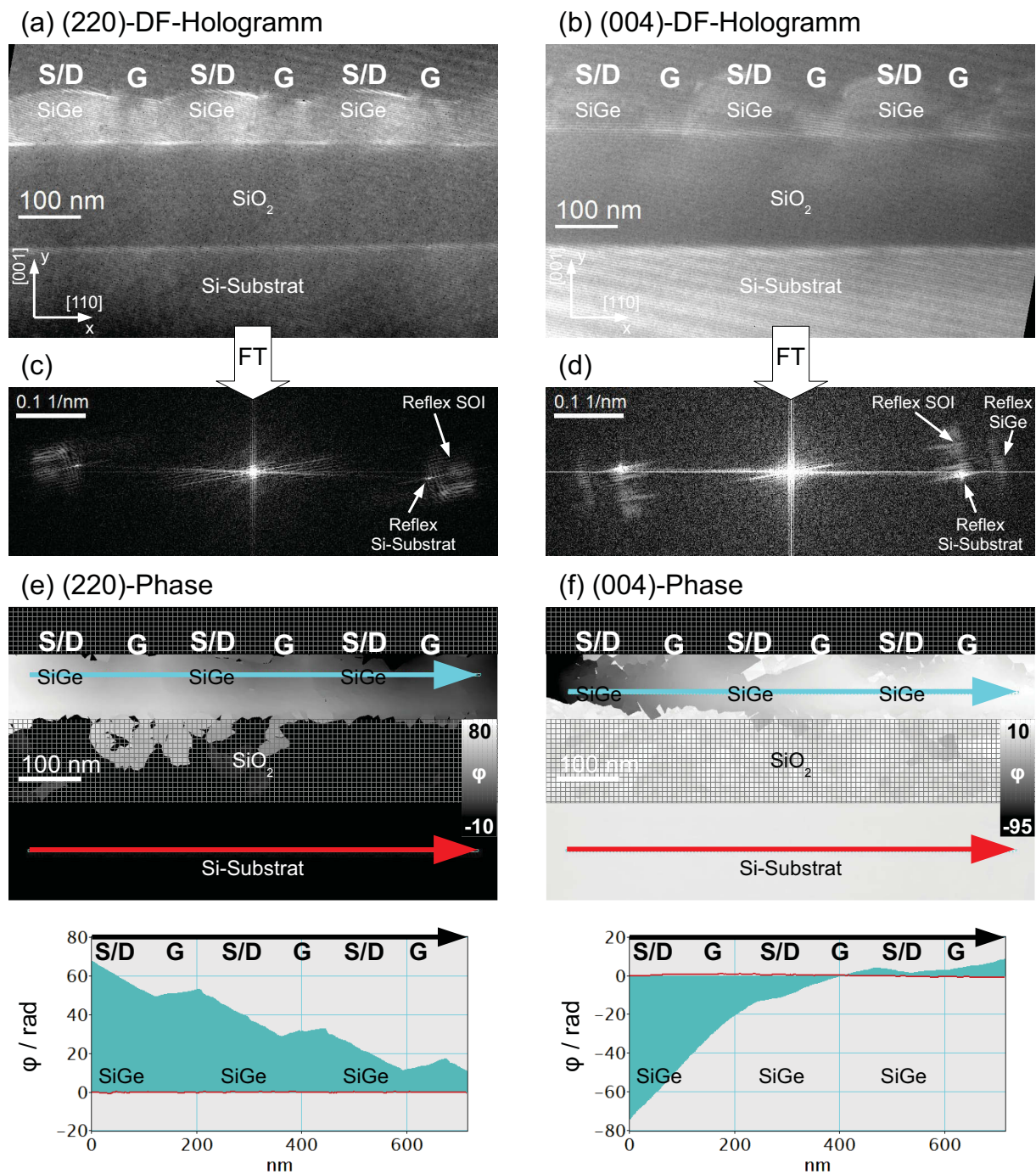


Abbildung 6.18: a) (220)- und b) (004)-DF-Hologramm einer SOI-Transistorstruktur an identischer Objektstelle. c) Spektrum des (220)- und d) des (004)-DF-Hologramms. Aufspaltung des Seitenbandreflexes in Anteile von SOI, SiGe und Si-Substrat. e) Rekonstruierte (220)-Phase: Charakteristischer Zickzack-Verlauf zw. Source, Gate u. Drain überlagert von einem globalen Phasenkeil in der SOI-Schicht. f) Rekonstruierte (004)-Phase: Ebenfalls Phasenkeil im SOI.

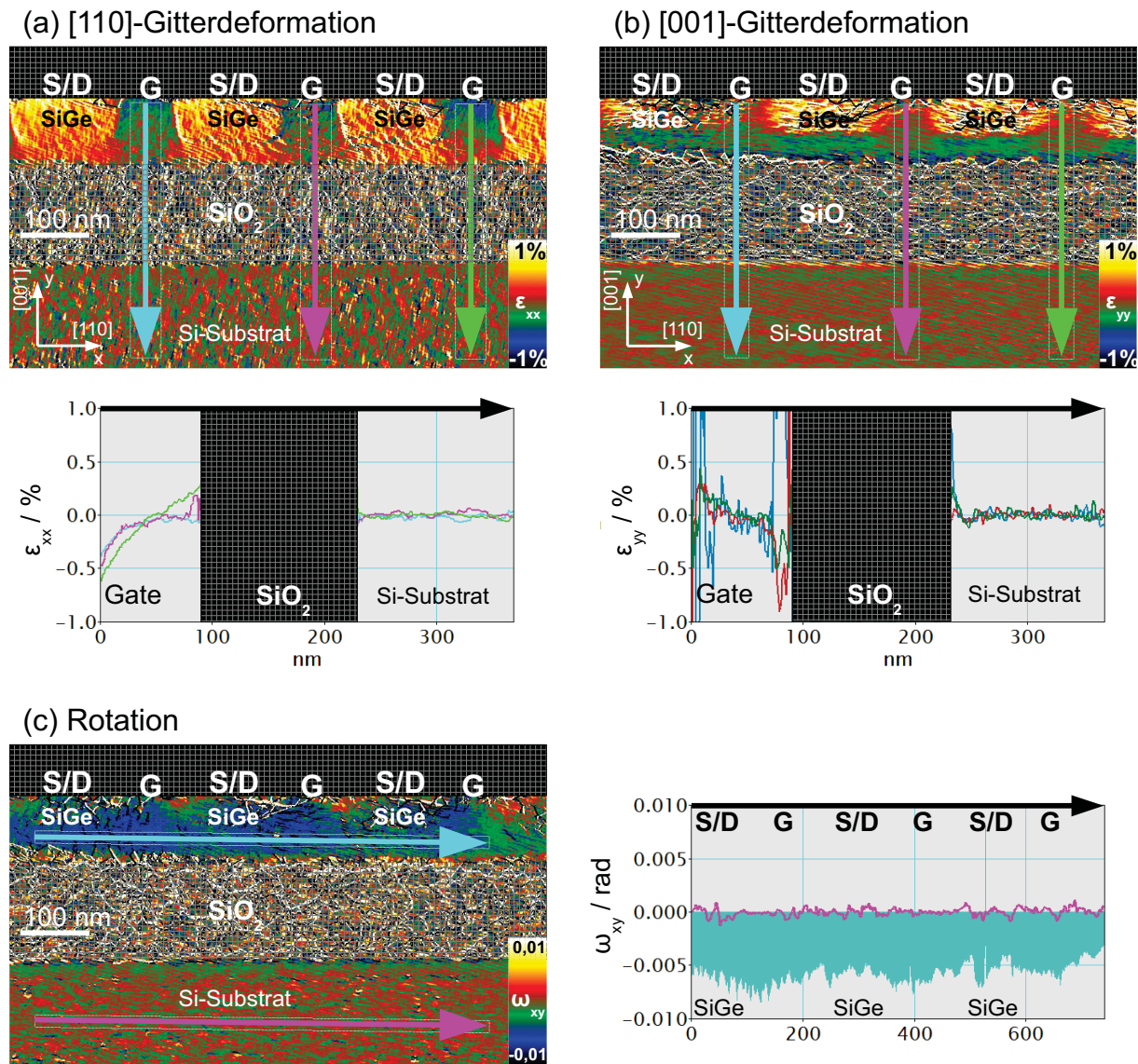


Abbildung 6.19: a) [110]-Deformationskarte: $-(0,5 \pm 0,05) \%$ kompressive Deformation unterhalb des Gatekontakts. Teilweise tensile Deformation oberhalb der Si/Isolator-Grenzfläche. b) [001]-Deformationskarte: SOI-Bereich stark verdrahtet. $+(0,3 \pm 0,15) \%$ tensile Deformation unterhalb des Gatekontakts und $-(0,5 \pm 0,15) \%$ kompressive Deformation oberhalb der Si/Isolator-Grenzfläche. c) Karte der Rotation ω_{xy} in Radian. Das SOI weist eine Rotation von $-(0,005 \pm 0,002) \text{ rad} = -(0,3 \pm 0,1)^\circ$ gegenüber dem Si-Substrat auf.

aufgezeichnet. Aus der Information über [110]- und [001]-Gitterdeformation wird anschließend die Rotation der SOI-Schicht gegenüber dem Si-Substrat bestimmt. Abbildung 6.18 fasst Aufnahme und Auswertung der DF-Hologramme bis zur Phasenrekonstruktion zusammen. Im (220)-DF-Hologramm beobachtet man eine höhere Intensität in der SOI-Schicht als im Si-Substrat (Abb. 6.18a). Dagegen ist insbesondere im (004)-DF-Hologramm die Intensität in der SOI-Schicht geringer als im Si-Substrat und der Kontrast in den Kanalbereichen mit $\mu < 5\%$ schwach (Abb. 6.18b). Es ist nicht möglich, SOI und Si-Substrat so zu orientieren, dass die Aufnahmebedingungen in beiden Bereichen ideal sind. Diese Beobachtung lässt sich als erster Hinweis darauf deuten, dass die SOI-Schicht eine leicht veränderte Kristallorientierung gegenüber dem darunterliegenden Si-Substrat besitzt. Weitere Hinweise finden sich im Spektrum der Hologrammintensität. Sowohl im (220)- als auch in (004)-DF-Hologramm lässt sich im Seitenband eine Aufspaltung des Reflexes in zwei oder drei Anteile beobachten (Abb. 6.18c und d). Mit Hilfe von Fourierfilterung lassen sich die Anteile wie gekennzeichnet der Beugungswelle Si-Substrats, des SOI oder der SiGe-Bereiche zuordnen. Die vorliegende Reflexaufspaltung liefert einen weiteren Hinweis auf eine Missorientierung zwischen SOI und Si-Substrat. Insbesondere im Spektrum des (004)-DF-Hologramms fällt auf, dass der Reflexanteil des SOI nicht auf einer Linie zwischen den Reflexanteilen von Si-Substrat und SiGe liegt. Besäße das SOI die gleiche Orientierung und Gitterkonstante wie das Si-Substrat, müssten sich beide Reflexanteile an der gleichen Stelle, der des Si-Reflexes, überlagern. Handelte es sich, wie zunächst erwartet, um eine Dehnung in [001]-Richtung, müsste der SOI-Reflex auf einer Verbindungslinie zwischen dem Si-Substratreflex und dem SiGe-Reflex liegen, weil die Gitterkonstante im gedehnten SOI größer als im Si-Substrat, aber kleiner als im SiGe ist. Bei einer Stauchung hingegen müsste der SOI-Reflex auf der Seite des Si-Reflexanteils liegen, der zum Zentralband hin zeigt, weil die Gitterkonstante im deformierten SOI kleiner als in Si-Substrat und SiGe ist. Tatsächlich befindet sich der SOI-Reflex aber leicht in Richtung SiGe-Reflex verschoben oberhalb bzw. unterhalb des Si-Reflexes.

In der Phase der (220)-Beugungswelle (Abb. 6.18e) beobachtet man wie schon in Abbildung 6.17c einen starken, globalen Phasenkeil entlang der [110]-Richtung, der den durch die lokalen Deformationen an Source und Drain hervorgerufenen zick-zack-förmigen Verlauf überlagert. Die Phase im Si-Substrat besitzt einen flachen Verlauf. Die Phase der (004)-Beugungswelle lässt sich aufgrund der Einschränkungen in Intensität und Kontrast nicht mit der selben Qualität rekonstruieren wie die (220)-Phase. Insbesondere bleiben nach dem *phase unwrapping* einige störende Phasensprünge zurück (Abb. 6.18f). Dennoch lässt sich auch in der (004)-Phase ein Phasenkeil in [110]-Richtung beobachten. Da jedoch die Ableitung der [001]-Deformation entlang der [001]-Richtung erfolgt, besitzt der Keil keine Auswirkungen auf die [001]-Deformation. Dagegen trägt der Keil zu einem erheblichen Anteil bei, wenn zur Rotationsbestimmung die Ableitung der (004)-Phase in x - bzw. [110]-Richtung vorgenommen wird.

Abbildung 6.19 zeigt die aus den Phasen abgeleiteten Deformationskarten, sowie die Rotation bezüglich des Si-Substrats. Die Auswertung der Gitterdeformation erfolgt für jeden Transistor entlang eines Linienprofils vom Gate über das SOI bis in das Si-Substrat. In der [110]-Deformationskarte misst man im Gatekanal eine kompressive Deformation von $\varepsilon_{xx} = -(0,50 \pm 0,05)\%$; das Ergebnis stimmt mit Abbildung 6.17d überein. An der SOI-Unterkante misst man dagegen nur teilweise eine tensile Deformation; maximal werden $\varepsilon_{xx} = +(0,20 \pm 0,05)\%$ erreicht. Das Ergebnis ist nicht so eindeutig wie in 6.19d, zeigt aber die gleiche Tendenz. Die Auswertung der [001]-Deformation wird durch die geringe Signalqualität in der SOI-Schicht stark eingeschränkt. Dennoch lässt sich im

Gatekanal trotz des enormen Rauschens eine tensile Deformation von $\varepsilon_{xx} = +(0,3 \pm 0,2) \%$ abschätzen. An der SOI-Unterkante misst man dagegen teilweise eine geringe kompressive Deformation von $\varepsilon_{xx} \approx -0,3 \%$. Dies entspricht also dem genau umgekehrten Verhalten wie in der [110]-Deformationskarte.

Aus der Ableitung der [110]-Phase in y - und der [001]-Phase in x -Richtung kann wie in Abschnitt 6.2.1 gezeigt wurde, die Rotation ω_{xy} bezüglich des Si-Substrats bestimmt werden. Abbildung 6.19c zeigt die resultierende Rotationskarte. Aus dem Linienprofil an der SOI-Unterkante lässt sich zunächst eine Rotation des SOI von $\omega_{xy} = -(5 \pm 2) \text{ mrad}$ gegenüber dem Si-Substrat ablesen, dies entspricht $-(0,3 \pm 0,1)^\circ$. Es ist jedoch auch ein leichter zick-zack-förmiger Verlauf im Rotationsprofil erkennbar, der mit $\pm 0,002 \text{ rad}$ um den SOI-Off-Set von $\omega_{xy} = -5 \text{ mrad}$ schwankt. Hierbei muss es sich um die lokale Rotation zwischen SOI und SiGe-Source/Drain-Gebieten handeln. Tatsächlich ließ sich bereits an den Σ -Cavities (Abschnitt 6.2.1, Abb. 6.9) eine lokale Rotation zwischen dem Si-Substrat und den SiGe-Source/Drain-Gebieten beobachten.

Die Ergebnisse illustrieren sehr anschaulich Einschränkungen und Herausforderungen der DFH bei der Messung mechanischer Verspannungen an Transistorstrukturen auf SOI. Bedingt durch ihr physikalisches Prinzip und ihren experimentellen Aufbau benötigt die DFH immer einen Referenzkristallbereich in (un)mittelbarer Nähe zu den verspannten Strukturen. Bei SOI-Wafern steht als Referenzkristall jedoch ausschließlich das Si-Substrat unterhalb der Isolationsschicht zur Verfügung. Bedingt durch den Herstellungsprozesses kann das SOI jedoch eine Missorientierung gegenüber dem Si-Substrat aufweisen. Bei der Herstellung von SOI-Wafern wird zunächst ein normaler Bulk-Si-Wafer an der Oberfläche oxidiert; das SiO_2 bildet die spätere Isolatorschicht. Anschließend wird Wasserstoff so in den Wafer implantiert, dass es sich in definiertem Abstand zur Oxidschicht in einer sehr dünnen Schicht im Si-Substrat anreichert. Auf den oxidierten Wafer wird ein Bulk-Si-Wafer aufgebracht und per Waferbondverfahren miteinander verbunden (CELLER und CRISTOLOVEANU 2003). Abschließend werden die verbundenen Wafer bei hohen Temperaturen getempert. Der zuvor implantierte Wasserstoff sammelt sich in Form kleiner Bläschen, die eine so große Spannung auf das umgebende Si ausüben, dass der restliche Bulkwafer abgesprengt wird. Zurück bleibt eine dünne Si-Schicht auf dem Isolator, deren Oberfläche in einem letzten Schritt poliert wird. Nun kann beim Waferbonding eine Missorientierung, der sogenannte *miscut*, zwischen SOI und Si-Substrat auftreten: Eine Rotation von SOI und Si-Substrat um die [001]-Achse und eine Rotation um eine dazu senkrechte Achse (FOURNEL *et al.* 2002). Letzteres lässt sich wie in Abbildung 6.19c gezeigt in der (x,y) -Ebene als eine Rotation des SOI gegenüber dem Si-Substrat beobachten, die eine zuverlässige Deformationsmessung im SOI erschwert. Es hat sich gezeigt, dass die DFH-Ergebnisse allein nicht zweifelsfrei erklären können, ob an der SOI-Unterkante tatsächlich eine tensile Deformation vorliegt oder es sich um einen Effekt der Missorientierung handelt. Da eine tensile Deformation jedoch im Widerspruch zu den theoretischen Erwartungen und NBD-Messungen an vergleichbaren Strukturen steht, kann man mit hoher Wahrscheinlichkeit davon ausgehen, dass hier tatsächlich die Missorientierung zwischen SOI und Substrat die Deformationsmessung beeinflusst. Aufgrund dieser Unwägbarkeiten bei der Interpretation der Ergebnisse scheint die DFH für SOI-Strukturen nur bedingt geeignet. Nanobeugung stellt hier vielleicht die bessere Alternative dar (ENGELMANN *et al.* 2006). Jedoch lassen sich mit ihr die bei den neuesten Strukturweiten benötigten Lateralaufösungen $< 4 \text{ nm}$ nur bedingt erzielen. Eine Erfolg versprechende Methode bei SOI scheint bisher nur High-Angle Angular Dark-Field (HAADF) im Transmissionsrasterelektronenmikroskop (STEM) in Kombination mit der Geometrischen

Phasenanalyse zu sein (COOPER *et al.* 2012). des SOI relaxiert.

6.4 Transistorstrukturen mit verspannten Deckschichten

Nachdem die DFH an Bulk-Si- und SOI-Strukturen ausreichend erprobt wurde, soll die Anwendung auch bei Strukturen erfolgen, bei denen die Verspannung des Kanalbereichs mittels verspannter Deckschichten erfolgt. Wie in Abschnitt 3.2.2 erläutert wurde, erlaubt die Abscheidung intrinsisch verspannter Nitridschichten (Plasma-Enhanced-Nitride, PEN) über den Transistoren, das Siliziumgitter im Kanal mit einer Zug- bzw. Druckverspannung zu versehen. Hierbei bestimmen Prozessparameter, ob die PEN-Schicht eine Zug- (Tensile-PEN, TPEN) oder Druckwirkung (Compressive-PEN, CPEN) auf das Si-Gitter im Kanal ausübt. Die Deckschichten sind mehrere zehn Nanometer dick und können intrinsische Verspannungen im GPa-Bereich aufweisen. Dazu entwickelt die Halbleiterindustrie teilweise neuartige Schichten, die den Eintrag mechanischer Spannungen in den Kanalbereich des Transistors erhöhen sollen. Hieraus erwächst die Notwendigkeit, ein zuverlässiges, quantitatives Analysewerkzeug zu finden, welches eine optimale Kontrolle des einprozessierten Spannungszustands ermöglicht. Ziel der Experimente ist es, zu klären, ob die DFH eine geeignete Analysemethode darstellt. Des weiteren ist das Experiment aus folgender Sicht interessant: Zum einen kommt die Methode der DFH hier zum ersten Mal an PEN-Strukturen zum Einsatz; bisher wurde sie fast ausschließlich an Transistorstrukturen mit SiGe-Source/Drain-Bereichen angewendet. Zum anderen stößt die von GLOBALFOUNDRIES verwendete Methode der Nanobeugung (NBD) bei diesen Strukturen an ihre Grenzen. Mit NBD konnte an PEN-Strukturen bisher weder Zug- noch Druckspannung nachgewiesen werden. Dies wird auf zwei Probleme zurückgeführt: Einerseits wird vermutet, dass die hohe Intensität des schmalen, aber parallelen Elektronenstrahl, mit dem die Probe abgerastert wird, zu Schädigungen an den verspannten Schichten führt, folglich auch zu einer Relaxation des verspannten Siliziums im Gatekanal. Andererseits erlaubt die NBD nur einzelne Messpunkte entlang eines Linienprofils aufzuzeichnen. Deshalb muss der Deformationsverlauf zwischen den Messpunkten interpoliert werden. Der Abstand der Messpunkte ist auf 6...10 nm begrenzt und stellt gleichzeitig die laterale Auflösungsgrenze der NBD dar. Dies kann unter Umständen zu Auflösungsproblemen an speziellen p-MOSFET-Strukturen wie in Abschnitt 6.4.3 führen. Dagegen beleuchtet die DFH die Probe großflächiger, so dass die Intensität auf der Probenoberfläche geringer ausfällt. Im Idealfall erhält man eine zweidimensionale Deformationskarte mit etwas besserer Auflösung von 4...8 nm.

6.4.1 Erste Experimente

In einem ersten Versuch werden drei unterschiedliche Transistorstrukturen untersucht: TPEN, CPEN und NPEN (neutral, ohne Verspannung). Dazu wird mittels FIB für jede Struktur eine lift-out TEM-Lamelle mit einer Objektdicke von ca. 120 nm präpariert. Anschließend werden (220)- und (004)-DF-Hologramme mit einer Hologrammbreite $w_{hol} = 200$ nm aufgezeichnet. Dies begrenzt zwar das Gesichtsfeld derart, dass nur ein einzelner Transistor im Hologramm abgebildet werden kann, jedoch erlaubt es, die Deformationsverteilung im Transistorkanal mit maximal 4 nm Lateralauflösung zu rekonstruieren.

Die Hoffnungen, die DFH könne die Verspannungen in PEN-Strukturen eindeutig bestimmen, bestätigen sich nur bedingt. Am CPEN kann wie mit NBD ebenfalls keine kompressive Verspannung nachgewiesen werden. Die elektrischen Messungen seitens GLOBALFOUNDRIES deuten aber auf eine kompressive Verspannung in [110]-Richtung hin. Allerdings konnte für den TPEN in Abbildung 6.20 entlang der [001]-Richtung eine

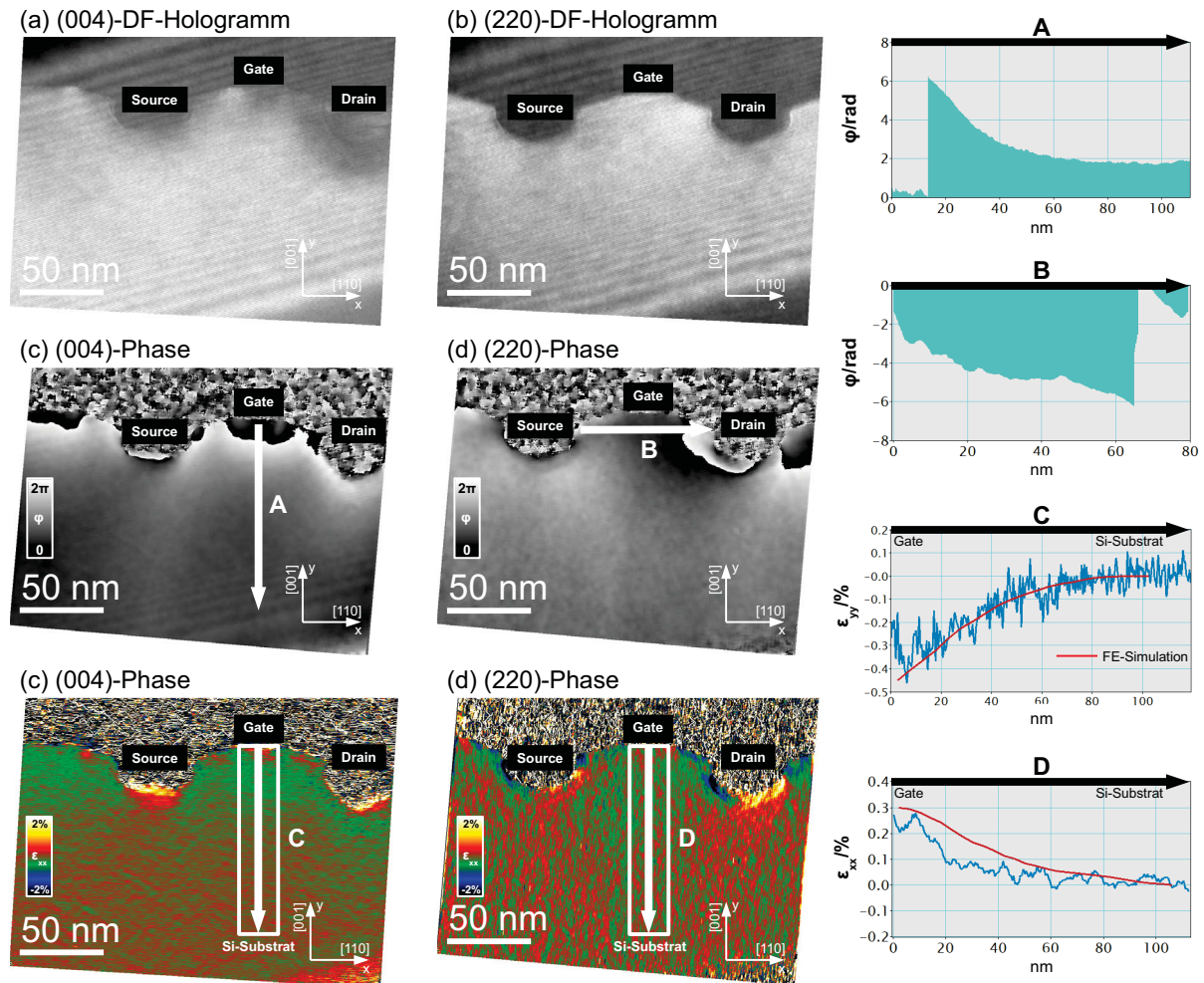


Abbildung 6.20: Deformationsmessung am n-MOSFET mit TPEN. a) (004)- und b) (220)-DF-Hologramm. c) Rekonstruierte (004)-Phase mit Gradient vom Gate ins Si-Substrat. d) Rekonstruierte (220)-Phase mit Gradient von Source nach Drain. e) [001]-Deformationskarte mit kompressiver Deformation im Gatekanal. f) [110]-Deformationskarte mit tensiler Deformation im Gatekanal des n-MOSFET.

kompressive Verspannung von $\varepsilon_{yy} = -(0,40 \pm 0,01) \%$ und in [110]-Richtung eine tensile Verspannung von $\varepsilon_{xx} = +(0,30 \pm 0,01) \%$ gemessen werden. Diese Werte liegen dicht an den Ergebnissen einer Simulation, die das *Fraunhofer Institut ENAS* durchgeführt hat. Diese sagt in [001]-Richtung eine kompressive Verspannung von $\varepsilon_{yy,sim} = -0,45 \%$ und in [110]-Richtung eine tensile Verspannung von $\varepsilon_{xx,sim} = +0,3 \%$ voraus. Entsprechend zeigen die Ergebnisse für den TPEN nach Größenordnung und Vorzeichen der Deformation die richtige Tendenz. Die leichte Abweichung von Experiment und Simulation kann auf zwei Ursachen zurückgeführt werden: Entweder handelt es sich schlicht um Relaxationseffekte bedingt durch die begrenzte Probendicke. Oder das Stressormaterial des TPEN wird auch bei der DFH im Elektronenstrahl zersetzt. Dabei wird vermutet, dass die Degradation des TPEN bei der DFH schwächer ist als bei NBD. Das würde erklären, wieso die DFH eine Deformation im Transistorkanal messen kann, aber die NBD nicht. Vermutlich degradiert das Verspannungsfeld des TPEN weniger als das des CPEN. Das wiederum würde erklären, wieso beim TPEN eine Verspannung gemessen werden konnte, beim CPEN jedoch nicht, obwohl die Verspannung und damit das Signal beim CPEN laut Simulation doppelt so groß sein sollte.

6.4.2 Mittels Wolframschicht verspannte Teststruktur

Um ausschließen zu können, dass die verspannten Schichten durch den Elektronenstrahl degradieren und relaxieren, wird eine neue Probe mit einer Wolframschicht als Stressor angefertigt. Dazu wird ein Bulk-Si-Wafer so prozessiert, dass anstatt der PEN-Schicht eine Wolframschicht über den Transistoren abgeschieden wird. Wolfram ist ein sehr hartes Material, von dem bekannt ist, dass es seinen Zustand im Elektronenstrahl des TEM nicht verändert. Abgeschieden auf die Transistoren führt Wolfram zu einer starken tensilen Verspannung des darunterliegenden Si im Gatekanal. An derselben Probe wurden Messungen des Deformationszustands in $[110]$ -Richtung zunächst mittels NBD, anschließend mittels DFH vorgenommen. Zusätzlich wurde der erwartete $[110]$ -Deformationszustand anhand der Geometrie und der verwendeten Materialien mittels einer Finite-Elemente-Rechnung durch das *Fraunhofer Institut ENAS* simuliert. Die Transistorstruktur wird als $15\text{ }\mu\text{m}$ lange TEM-Lamelle per FIB-Lift-Out aus dem Wafer präpariert. Mittels konvergenter Beugung (CBED) konnte an der untersuchten Objektstelle die Objektdicke zu $(230 \pm 10)\text{ nm}$ bestimmt werden. Nach Abschnitt 5.11.2 erwartet man bei ca. 240 nm ein Maximum der Intensität in der (220) -Beugungswelle. Tatsächlich besitzen die Hologramme hier eine vergleichsweise hohe Intensität und einen hohen Kontrast ($\mu > 12\%$). Das Ergebnis der DFH-Messung für die $[110]$ -Deformation ist in Abbildung 6.21 gezeigt. Die gute Übereinstimmung zwischen der experimentellen Deformationskarte und der Simulation für die $[110]$ -Gitterverspannung wird bereits bei einem rein qualitativen Vergleich deutlich. Die Messwerte für die drei Linienprofile A, B, C vom Transistor-Gate ins Si-Substrat bestätigen die Übereinstimmung auch quantitativ. Im Kanal aller drei Transistoren A, B, C wird die maximale Zugspannung $\varepsilon_{xx} = +(0,3 \pm 0,01)\%$ erreicht. Die Linienprofile liegen sehr genau auf der simulierten Kurve. Profil C zeigt im Si-Substrat eine leichte Abweichung von $-0,02\%$ gegenüber Profil A und B. Vermutlich liegt hier ein Einfluss der Grabenisolation (engl.: *shallow-trench-isolation*, STI) rechts neben Transistor C vor. Die verspannte Wolframschicht ist auch oberhalb der STI abgeschieden und wirkt daher auch auf die STI. Außerdem ist zu vermuten, dass die mit Oxid oder Nitrit gefüllten STI selbst eine Spannung auf das dazwischen liegende Si-Substrat ausüben. Betrachtet man die Phase der (220) -Beugungswelle in Abbildung 6.21c, so ist deutlich eine Modulation der Phase bis zu $\pi/4$ im Si-Substrat unmittelbar neben dem linken und rechten STI zu erkennen. An der unteren Spitze der STI treten noch stärkere Modulationen auf. Jedoch sind diese weit genug von den Transistoren entfernt, so dass sie auf diese keinen Einfluss ausüben. Lediglich die Modulationen nahe der STI führen zu den leichten Schwankungen der Linienprofile A, B, C im Si-Substrat. Der Stresseintrag der STI könnte an einfachen Teststrukturen weiter untersucht werden, falls dazu die technologische Notwendigkeit besteht.

Im Gegensatz zur DFH führt die Messung mit NBD zu einem Ergebnis mit geringerer Genauigkeit. Es folgt in der Tendenz der DFH und der Simulation. Eine tensile Deformation zum Transistor-Gate wird erkannt. Jedoch streuen die Werte der NBD-Messung sehr stark. Insbesondere der Messpunkt bei $y = 85\text{ nm}$ muss als „falsch“ betrachtet werden. Gerade dort, wo die Gitterverspannung besonders genau bestimmt werden soll, im Kanalbereich $y < 60\text{ nm}$, streuen die Messpunkte stark. Als nachteilig stellt sich heraus, dass die Messpunkte nur im Abstand von 10 nm aufgenommen werden. Über eine Länge von 120 nm erhält man 11 Messpunkte. Durch Interpolation der Punkte ergibt sich ein Deformationsverlauf, der aber eine deutlich höhere Deformation im Gatekanal angibt, als die Simulation vorhersagt.

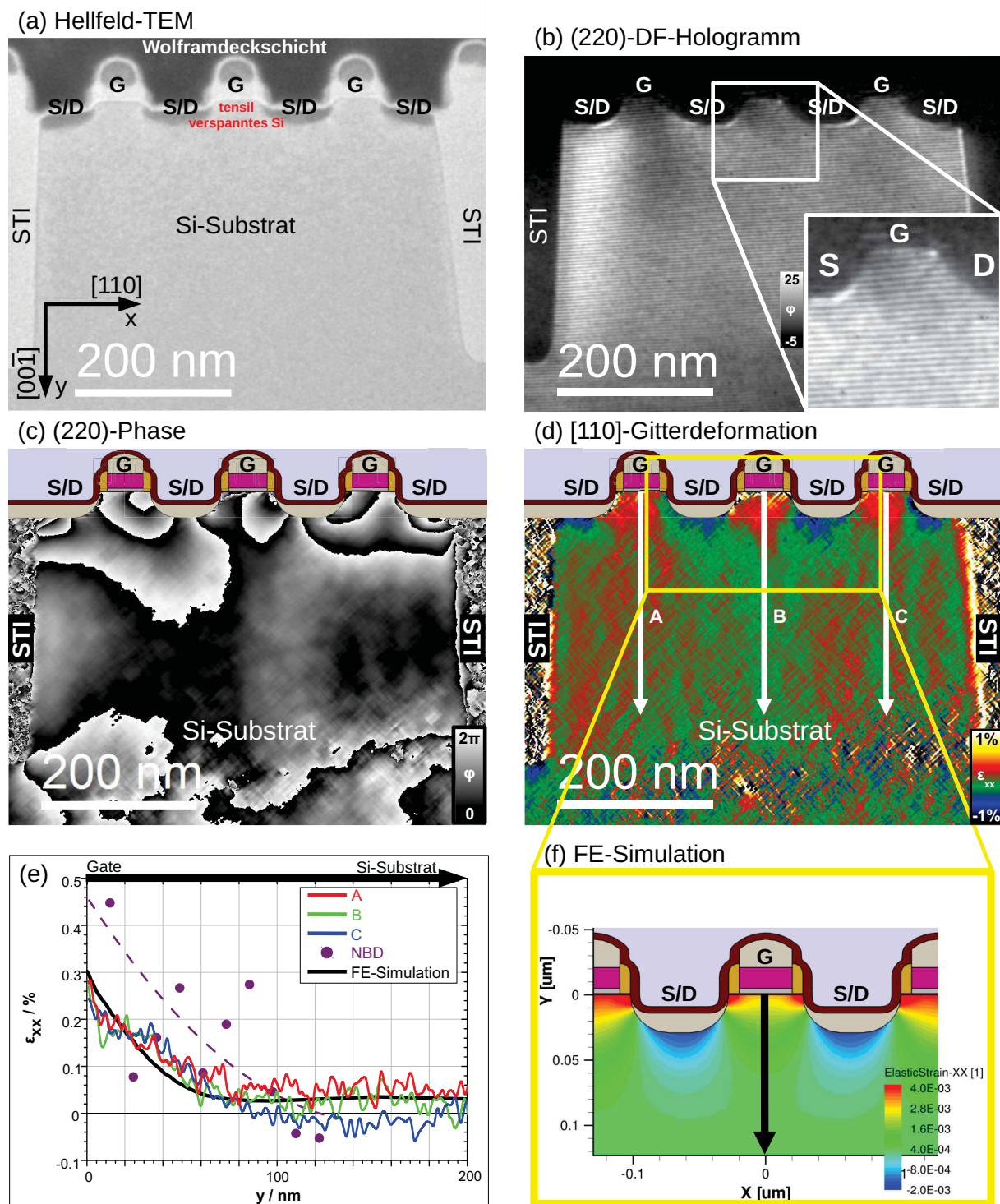


Abbildung 6.21: Tensil verspannende Wolframdeckschicht: a) Hellfeld-TEM-Aufnahme der untersuchten Transistorstruktur. Die W-Deckschicht überträgt eine tensile Verspannung in den Gatekanal. Dabei wird, um den Gesamtspannungszustand auszugleichen, eine kompressive Spannung an Source/Drain erzeugt. STI bezeichnet die Grabenisolation, welche Gruppen von Transistoren elektrisch voneinander isoliert. b) (220)-DF-Hologramm mit vergrößerter Darstellung des mittleren Transistors. c) Rekonstruierte (220)-Phase. d) [110]-Deformationskarte. Für den gelb markierten Bereich wurde der Deformationszustand mittels Finite-Elemente-Rechnung in f) simuliert. e) Linienprofile A, B und C aus der [110]-Deformationskarte im Vergleich zur FE-Simulation und NBD-Messung (mit violett gestrichelter Kurve als Fit an die NBD-Messung).

6.4.3 Mittels TPEN-Schicht verspannter n-MOSFET

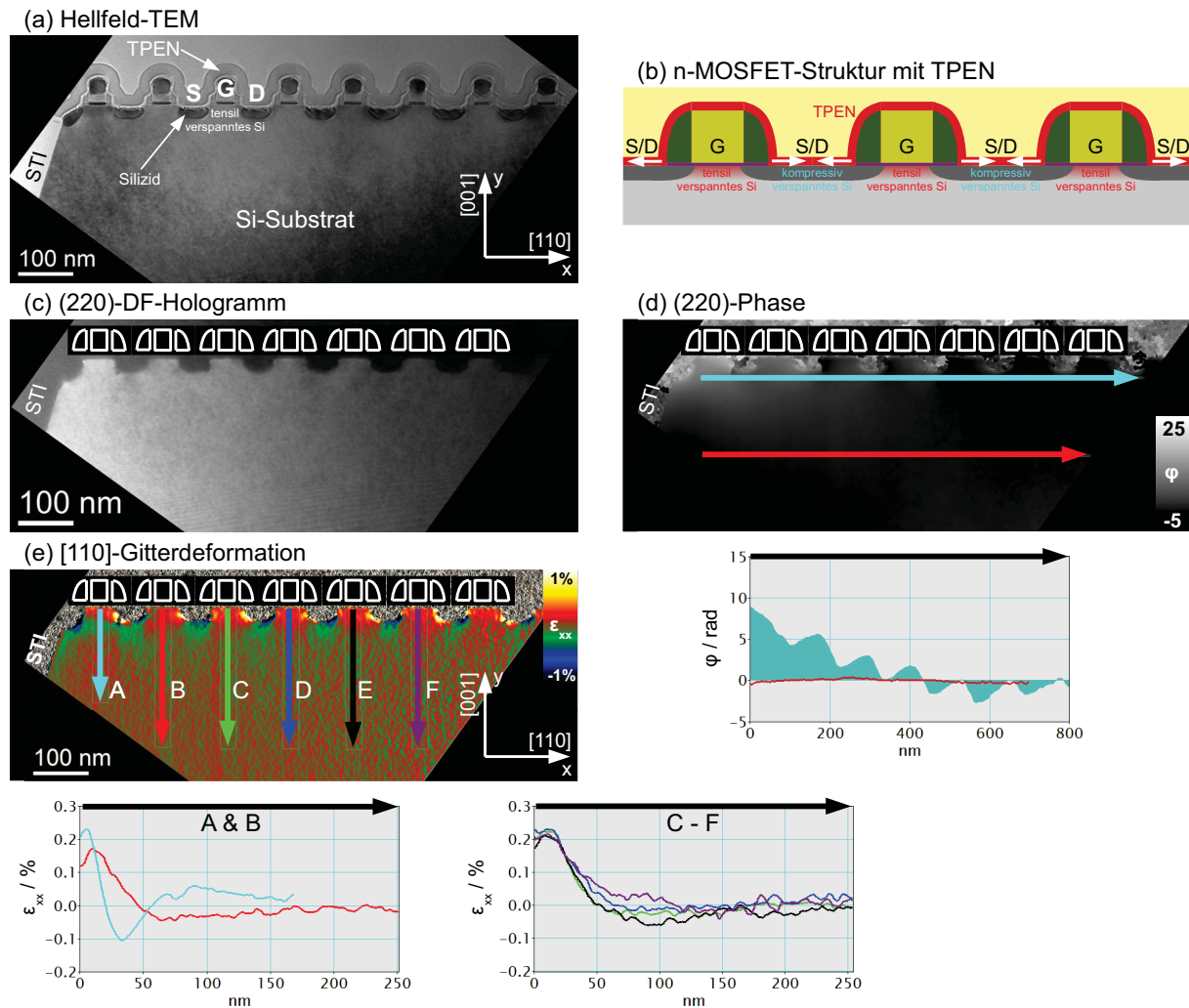
Ermutigt durch die Ergebnisse an der Teststruktur mit Wolfram-Stressor, wird eine weitere Transistorstruktur mit TPEN untersucht, die in dieser Art bei *GLOBALFOUNDRIES* auch tatsächlich in realen Halbleiterbausteinen eingesetzt wird und keine reine Teststruktur darstellt.

Abbildung 6.22 fasst die Ergebnisse des DFH-Experiments zusammen. In der Hellfeld-TEM-Aufnahme (Abb. 6.22a) lässt sich die über den Transistoren abgeschiedene TPEN-Schicht deutlich erkennen. An Source und Drain wurden bereits Silizidkontakte prozessiert. Sie sind jedoch noch nicht mit den Metalleiterbahnen verbunden. Teilweise sind größere Gruppen von Transistoren durch Grabenisolation (STI) voneinander getrennt. Die Verspannungsgeneration durch eine TPEN-Deckschicht im Transistor kann mit Hilfe von Abbildung 6.22b qualitativ wie folgt erklärt werden: Die Deckschicht mit seiner intrinsischen Verspannung tendiert dazu, sich zusammenzuziehen, wie durch die weißen Pfeile angedeutet ist. Da die Deckschicht aber mechanisch an die Source/Drain-Gebiete, die Spacer und das Gate koppelt, wirken diese Regionen dem Zusammenziehen der Deckschicht entgegen. Infolge dessen werden die Source/Drain-Gebiete, die Spacer und das Gate verspannt, was sich schließlich durch deren Nähe zum Kanalgebiet in eine tensile Verspannung des Si im Transistorkanal überträgt. Dagegen entsteht an den Source/Drain-Gebieten aufgrund des Zusammenziehens der TPEN-Deckschicht eine kompressive Verspannung.

Zur Messung der $[110]$ -Gitterdeformation wird eine Serie von 15 (220) -DF-Hologrammen aufgezeichnet und nach der in Abschnitt 5.10 erläuterten Methode rekonstruiert. Bei einer Hologrammbreite $w_{hol} = 800\text{ nm}$ lassen sich so 7 Transistoren abbilden. Die TEM-Lamelle wird auch hier mittels FIB und Lift-out präpariert. Die Objektdicke wird aus Hellfeldhologrammen zu 130 nm abgeschätzt (vgl. Abschnitt 6.1). Nach der Rekonstruktion besitzt die gemittelte (220) -Phase eine Lateralauflösung von 4 nm . In der gemittelten (220) -Phase (Abb. 6.22d) beobachtet man den typischen, durch die lokalen Deformationen an Source/Drain und im Kanalbereich hervorgerufenen zick-zack-förmigen Phasenverlauf zwischen Source, Gate und Drain. Nahe der Grabenisolation (STI) wird dieser Verlauf jedoch von einem Gradienten überlagert. Hierbei handelt es sich um Einflüsse durch die STI, die selbst Spannungen in das sie umgebende Si induziert. Nach Ableitung der $[110]$ -Deformationskarte (Abb. 6.22e) lässt sich im Transistorkanal an den Transistoren C, D, E und F eine tensile Deformation von $\varepsilon_{xx} = +(0,23 \pm 0,05)\%$ nachweisen. Die Deformationsprofile vom Gate ins Si-Substrat wurden über die Gatebreite von 45 nm gemittelt, um das Rauschen zu reduzieren. Wieso der Deformationswert direkt am Gate auf $\varepsilon_{xx} = +(0,20 \pm 0,05)\%$ abfällt, konnte bisher nicht erklärt werden. Durch Testen unterschiedlich starker Verkipnungen der Probe aus der Zonenachse in den Zweistrahlfall konnte zumindest ausgeschlossen werden, dass es sich um einen Projektionseffekt handelt. Die Deformationsverläufe an den Transistoren A und B weichen aufgrund des Einflusses der Grabenisolation stark ab. Dagegen lässt sich an den Source/Drain-Gebieten aller Transistoren die erwartete kompressive Verspannung erkennen, die direkt unterhalb des Silizid-Kontakts $\varepsilon_{xx} = -(0,42 \pm 0,05)\%$ beträgt.

6.4.4 Mittels CPEN-Schicht und SiGe verspannter p-MOSFET

Neben der n-MOSFET-Struktur in Abschnitt 6.4.3 soll nun die entsprechende, komplementäre p-MOSFET-Struktur untersucht werden. Allerdings basiert die Verspannungsgeneration im p-MOSFET auf einer Kombination von



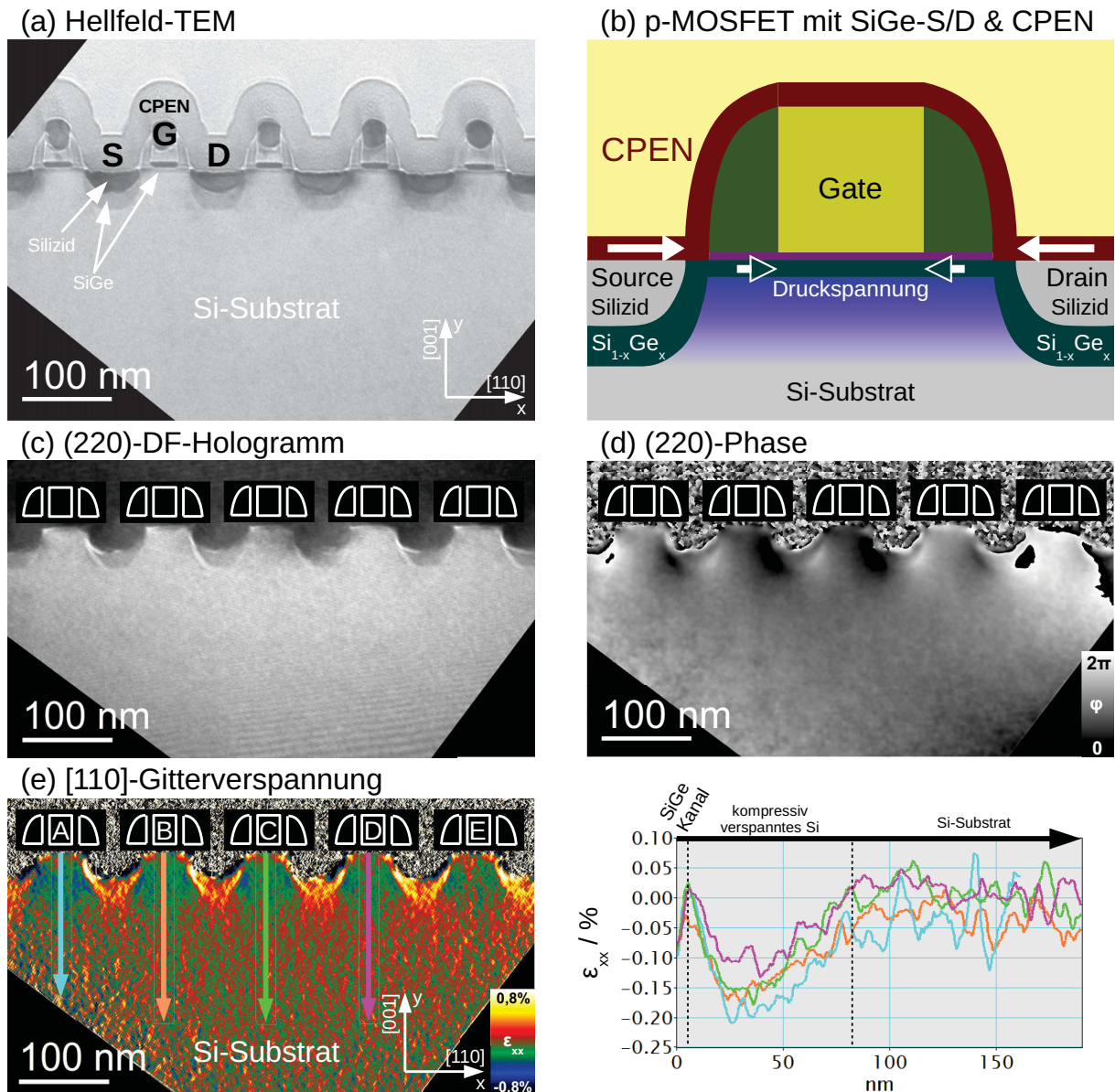


Abbildung 6.23: Deformationsmessung am p-MOSFET: a) Hellfeld-TEM-Aufnahme der untersuchten p-MOSFET-Struktur auf Bulk-Si-Substrat mit SiGe-Source/Drain und SiGe-Kanal. b) Skizze zur Spannungserzeugung: SiGe-Source/Drain üben Druckspannung auf das dazwischen liegende Si aus. CPEN-Schicht sorgt für zusätzlichen kompressiven Spannungseintrag in das SiGe im Transistorkanal. c) (220)-DF-Hologramm und d) Rekonstruierte (220)-Phase. e) [110]-Deformationskarte: $(0,10 \pm 0,05) \%$ kompressive Deformation im SiGe-Transistorkanal. Relaxation an SiGe/Si-Grenzfläche in ca. 5 nm Tiefe. $(0,20 \pm 0,1) \%$ kompressive Deformation des Si zwischen SiGe-Source/Drain. Ab 80 nm undeformiertes Si-Substrat.

kompressiv verspannter Deckschicht (CPEN) und herkömmlichen „U“-förmigen SiGe-Source/Drain-Gebieten. Außerdem besitzt der p-MOSFET einen SiGe-Kanal. Abbildung 6.23a zeigt eine Hellfeld-TEM-Aufnahme der Struktur. Die CPEN-Deckschicht ist über dem Source/Drain-Bereich, den Spacern und dem Gate abgeschieden. An Source/Drain befinden sich wie beim n-MOSFET bereits die Silizidkontakte. Des weiteren lassen sich die ins Si-Substrat eingelassenen „U“-förmigen SiGe-Bereiche erkennen. Bei dieser Auflösung nur schwer zu erkennen ist dagegen die nur 5 nm dicke SiGe-Schicht im Transistorkanal. Die Verspannungsgeneration im Kanal lässt sich mit Hilfe der Skizze in Abbildung 6.23b erläutern. Anders als beim n-MOSFET tendiert die intrinsische Verspannung der CPEN-Deckschicht dazu, sich auszudehnen, wie durch die weißen Pfeile angedeutet ist. Durch die mechanische Kopplung der CPEN-Deckschicht an die Source/Drain-Gebiete, die Spacer und das Gate, wirken diese Regionen der Ausdehnung entgegen. Dadurch werden die Source/Drain-Gebiete, die Spacer und das Gate derart verspannt, dass eine kompressive Verspannung auf das SiGe im Transistorkanal übertragen wird. Zusätzlich erzeugen die SiGe-Bereiche an den Source/Drain-Gebieten eine kompressive Verspannung in dem unter dem SiGe-Kanal befindlichen Si. Bei dem SiGe im Transistorkanal des p-MOSFET nutzt man aus, dass SiGe bereits unverspannt eine höhere intrinsische Ladungsträgerbeweglichkeit besitzt als Si. Durch die Druckspannung im Kanal lässt sich diese weiter verbessern.

Für das Experiment wurde mit FIB und Lift-out eine TEM-Lamelle von 150 nm Dicke präpariert. Um die $[110]$ -Gitterverspannung zu bestimmen, wird das in Abbildung 6.23c gezeigte (220) -DF-Hologramm aufgezeichnet. Dabei wird diesmal darauf geachtet, einen gewissen Abstand zu den Grabenisolationen (STI) einzuhalten, um zu verhindern, dass deren Spannungseintrag die Ergebnisse der Deformationsmessung an den Transistoren verfälscht. Wie beim n-MOSFET mit TPEN beträgt die Hologrammbreite $w_{hol} = 800$ nm. Die Lateralauflösung in der (220) -Phase (Abb. 6.23d) sowie in der daraus abgeleiteten Deformationskarte (Abb. 6.23e) erreicht ebenfalls 4 nm. Die Auswertung der $[110]$ -Deformation erfolgt an den Transistoren A, B, C und D entlang von Linienprofilen, die von Gate bis ins Si-Substrat reichen. Transistor E wird nicht ausgewertet, da sich hier bereits Effekte der STI bemerkbar machen, die sich ca. 150 nm rechts von Transistor E außerhalb des Gesichtsfelds befindet. Den Linienprofilen entnimmt man, dass das SiGe im Transistorkanal mit $\epsilon_{xx} = +(0,10 \pm 0,05) \%$ kompressiv gegenüber dem Si-Substrat als Referenz deformiert ist. An der Grenzfläche zwischen der SiGe-Schicht und dem Si tritt eine Relaxation des SiGe-Gitters auf. Das SiGe-Gitter besitzt dort die in-plane Gitterkonstante von unverspanntem Si. Mit wachsendem Abstand zum Gate wird das Si unterhalb der SiGe-Schicht zunächst immer stärker deformiert, bis es in einer Tiefe von 40 nm seine größte kompressive Deformation $\epsilon_{xx} = -(0,15 \pm 0,05) \%$ erreicht. Allerdings weichen hier die einzelnen Profile teilweise um $\Delta\epsilon_{xx} = \pm 0,05 \%$ voneinander ab. Ab einer Tiefe von 80 nm ist das Si vollständig relaxiert; es wird das Si-Substrat erreicht, das in diesem Experiment als Referenzkristall dient. Im Bereich des Si-Substrats hat man aufgrund der beschränkten Qualität der DF-Hologramme mit einem hohen Signalrauschen $\sigma_{\epsilon_{xx}} = \pm 0,1 \%$ zu kämpfen. Im Gegensatz zum n-MOSFET in Abschnitt 6.4.3 wurde hier keine Hologrammserie aufgezeichnet, sondern nur ein einzelnes Hologramm mit 20 s Belichtungszeit.

Die Interpretation der Ergebnisse ist aufgrund der verschiedenen Stressormaterialien und der komplexen Verspannungsgeneration im p-MOSFET schwierig. Eine FE-Simulation des Deformationszustandes könnte helfen, den Spannungseintrag in den Transistorkanal genauer zu verstehen. Vergleichende Messungen mittels Nanobeugung (NBD) sind bisher daran

gescheitert, dass die NBD nicht in der Lage ist, die SiGe-Schicht im Transistorkanal adäquat abzurastern, da die Schichtdicke von 5 nm gerade den Bereich der Auflösungsgrenze der NBD erreicht. Damit stellt die DFH bisher die einzige Methode dar, welche die Deformationsfelder an der untersuchten p-MOSFET-Struktur mit der benötigten Lateral- und Signalauflösung quantitativ abbilden kann.

6.5 Zusammenfassung

Dieses Kapitel hat das Potential der DFH zur präzisen, quantitativen Messung von zweidimensionalen Deformationsverteilungen in modernen Transistorstrukturen an drei grundlegenden Beispielen demonstriert: verspannte SiGe-Schichten, mittels SiGe-Source/Drain-Gebieten, sowie durch spezielle Deckschichten (PEN) verspannte Transistoren. Dabei erleichtert die Variabilität in Lateralauflösung (3...10 nm) und Gesichtsfeld (200...800 nm), die Deformationsmessung an die durch die spezifische Transistorstruktur gegebene Form und Verteilung des Deformationsfeldes anzupassen. Die Signalauflösung ($\Delta\epsilon = \pm 0,05\%$) ist äquivalent zu anderen Methoden der Deformationsbestimmung, z.B. mittels Nanobeugung (NBD) oder konvergenter Elektronenbeugung (CBED). Ihnen gegenüber besitzt die DFH als abbildende Methode den Vorteil, die Deformationsverteilung als zweidimensionalen Deformationskarte zu erfassen, statt wie die genannten Rastermethoden nur entlang eindimensionaler Linienprofile zu messen. Bei PEN-verspannten Transistoren erlaubt die DFH sogar, die Deformationen mit höherer Präzision als mittels NBD zu bestimmen. Die Übereinstimmung von DFH-Ergebnissen mit NBD-Messungen und Finite-Elemente-Simulationen an mit SiGe und PEN verspannten Transistorstrukturen beweist, dass die DFH in der Lage ist, auch kleinste Deformationen ($\epsilon = 0,1 \dots 0,3\%$) mit der benötigten Genauigkeit und Zuverlässigkeit zu messen. Sie unterstreichen eindrucksvoll die Eignung der DFH, alleine oder in Ergänzung zu NBD, als Methode zur Analyse (*engl.: metrology*) von Deformationsverteilungen in aktuellen und zukünftigen Halbleiterbauelementen.

7 Zusammenfassung

Die Dunkelfeld off-axis Elektronenholographie (DFH) erlaubt, Deformationsfelder in Halbleiterkristallen quantitativ zu vermessen. Die durch die Deformationen im Kristall herbeigeführten lokalen Änderungen der Gitterkonstanten und Netzebenenabstände lassen sich als geometrische Phase in den Beugungswellen beobachten. Dazu wird eine Beugungswelle des Kristalls ausgewählt: Durch Überlagerung des Teils der Beugungswelle, der an dem deformierten Kristallbereich gebeugt wurde, mit dem anderen Teil derselben Beugungswelle, der an dem undeformierten Kristallbereich gebeugt wurde, wird die Beugungswelle in einem Dunkelfeldhologramm aufgezeichnet. Nach der Rekonstruktion des DF-Hologramms erhält man Amplitude und geometrische Phase der Beugungswelle. Da die Gradienten in der geometrischen Phase proportional zur Stärke des Deformationsfeldes sind, erlauben sie, das Deformationsfeld in Form einer zweidimensionalen Deformationskarte zu quantifizieren. Durch Ableitung der geometrischen Phase in der zu den beugenden Netzebenen äquivalenten Gitterrichtung erhält man die Komponente des Deformationsfeldes in diese Richtung. Die Auswertung von zwei Beugungswellen linear unabhängiger Richtungen erlaubt alle Komponenten des Deformationsfeldes in der Projektionsebene zu bestimmen.

Grenzleistungen: Gesichtsfeld und Lateralauflösung

Die DFH wird im *Speziallabor Triebenberg* am *Tecnai F20* TEM realisiert. Um die für die Abbildung von Halbleiterstrukturen notwendigen Gesichtsfelder und Auflösungen zu erzielen, müssen einige Anpassungen an der Optik des TEM vorgenommen werden. Die Verwendung eines Hardwareaberrationskorrektors von *CEOS* als Pseudo-Lorentz-Linse in Kombination mit veränderten Beugungslinsenanstörungen erlaubt, bei der Aufnahme von DF-Hologrammen folgende Grenzleistungen zu erzielen: Mit einer $1k \times 1k$ CCD-Kamera lassen sich DF-Hologramme mit 200 nm Gesichtsfeld bei 3 nm Lateralauflösung oder 800 nm Gesichtsfeld bei 8 nm Lateralauflösung aufzeichnen; nach Wechsel auf eine $2k \times 2k$ CCD-Kamera beträgt die Lateralauflösung maximal 4 nm bei 800 nm Gesichtsfeld. Damit erfüllt die DFH die Anforderungen für aktuelle Halbleiterstrukturen mit 32 nm- oder 26 nm-Strukturbreite als auch für zukünftige Strukturbreiten bis hinunter zu 16 nm.

Instrumentelle Einschränkungen

Instrumentelle Einschränkungen existieren bei der Abbildung von Beugungswellen höherer Ordnungen. Denn die Dunkelfeldabbildung im Zweistrahlfall mit gekippter Beleuchtung, bei welcher der abgebeugte Strahl unterhalb des Objekts entlang der optischen Achse verläuft, lässt sich nur für die (220)- und (111)-Beugungsbedingung realisieren, da die Beleuchtungskippung auf maximal 15 mrad begrenzt ist. Bei der (004)-Beugungsbedingung verläuft der abgebeugte Strahl daher ca. 3 mrad schräg zur optischen Achse, so dass die dadurch induzierten Abbildungsfehler, wie Astigmatismus und Koma, mit dem Hardwareaberrationskorrektor aufwendig korrigiert werden müssen. Diese Einschränkungen an aktuellen TEMs lassen sich letztlich nur durch die Konstruktion neuer, speziell auf die Bedürfnisse der DFH optimierte TEMs beheben. Ein erstes TEM dieser Art wurde vor

kurzem am CEMES in Toulouse in Betrieb genommen (HÛTCH *et al.* 2012b). Unter anderem soll es die Aufnahme von (008)-DF-Hologrammen erlauben und noch mehr Freiheitsgrade bei Gesichtsfeld und Lateralauflösung bieten. Des weiteren ermöglicht eine zusätzliche Zwischenlinse und die Verwendung von zwei Biprismen, die untereinander in optisch konjugierten Ebenen angebracht sind, die störenden Fresnelschen Beugungssäume bereits bei Aufnahme der DF-Hologramme zu vermeiden (HÛTCH *et al.* 2012b).

Signalauflösung

Die Signalauflösung hat sich in dieser Arbeit als kritischer Punkt bei der Anwendung der DFH herausgestellt. Denn die zur Bestimmung der Deformationsverteilung notwendige numerische Ableitung der geometrischen Phase verstärkt das Rauschen in der Deformationskarte. Ziel ist daher, eine möglichst rauscharme Phasenverteilung zu rekonstruieren, bevor aus dieser die Deformationskarte abgeleitet wird. Das Rauschen in der rekonstruierten Phasenverteilung hängt wie in der Hellfeld off-axis Elektronenholographie vom Kontrast der Interferenzstreifen, also einerseits von der Kohärenz der Elektronenquelle sowie von Instabilitäten, andererseits von der Anzahl der pro rekonstruierten Pixel detektierten Elektronen ab, ist also auch an die Auflösung gekoppelt. Hinsichtlich der Instabilitäten stellt das *Speziallabor Trieben* eine optimale Umgebung zur Verfügung. Einzig die Instabilität des *Tecnai F20* TEM selbst wirkt sich hier limitierend aus und kann nicht mehr mit den z.Z. modernsten TEMs mithalten; so lassen sich in der Regel Belichtungszeiten um 20 s mit einem durchschnittlich Interferenzstreifenkontrast von 13 % erreichen. Die Aufnahme der DF-Hologramme erfolgt im Zweistrahlfall, um die Intensität in der Beugungswelle zu erhöhen. Somit hängt die Anzahl der detektierten Elektronen von der gewählten Beugungsbedingung und der Objektdicke ab. Im Zweistrahlfall erreicht die Intensität bei halben Vielfachen der Extinktionsdicke ein Maximum. Experimentell hat sich eine Objektdicke um 120 nm als besonders geeignet herausgestellt, da hier ausreichend Intensität sowohl in der (220)- als auch in der (004)-Beugungswelle beobachtet werden kann. Bei kleineren Objektdicken besteht die Gefahr, dass Relaxationseffekte zunehmen. Bei größeren Objektdicken geht zu viel Intensität bei der Streuung in höhere Beugungsordnungen verloren. Bei der Aufnahme eines DF-Hologramms unter den genannten Bedingungen lassen sich somit durchschnittlich 1500 Elektronen pro CCD-Pixel detektieren. In der Deformationskarte lässt sich letztlich eine Signalauflösung von durchschnittlich $\sigma_\epsilon = \pm 0,1\%$ erzielen, die in Einzelfällen auch $\sigma_\epsilon = \pm 0,05\%$ betragen kann. Generell lässt sich durch Aufnahme und Rekonstruktion einer Dunkelfeldhologrammserie die Signalauflösung im Vergleich zu Einzelhologrammen verbessern, wobei bisher eine Signalauflösung von durchschnittlich $\sigma_\epsilon = \pm 0,05\%$ bei Aufnahme von 20 Hologrammen erreicht wird. Damit werden auch die von der Halbleiterindustrie gestellten Anforderungen an die Signalauflösung (besser als $\sigma_\epsilon = \pm 0,1\%$) erfüllt. Stabilere TEMs der neuesten Generation oder eine Aufzeichnung einer größeren DF-Hologrammserie könnten erlauben, in Zukunft eine weitere Verbesserung der Signalauflösung bis zu $\sigma_\epsilon = \pm 0,01\%$ zu erreichen.

Für den Fall, dass trotz allem eine stark verrauschte geometrische Phase aus einem DF-Hologramm rekonstruiert wird, kann eine Rauschfilterung oder Glättung vorgenommen werden. So kann eine Wienerfilterung der DF-Hologrammintensität das Rauschen in der Deformationskarte um den Faktor 1,5...2 reduzieren. Eine Glättung der Phasenverteilung durch Anwendung eines Glättungsfilters erlaubt zwar die Signalauflösung auf $\sigma_\epsilon \approx \pm 0,03\%$ zu verbessern. Allerdings verliert man so deutlich an Lateralauflösung, dass sich die von der Halbleiterindustrie geforderte Grenze einer Lateralauflösung besser als 5 nm nicht mehr

einhalten lässt.

Artefakte bei Präparation und Rekonstruktion

Neben der Signalauflösung existiert eine ganze Reihe unterschiedlicher Artefakte, welche erheblichen negativen Einfluss auf die korrekte Bestimmung der Deformationskarte aus der geometrischen Phase besitzen. Zu unterscheiden sind hier zum einen präparationsbedingte, zum anderen instrumentelle oder methodisch bedingte Einflüsse. Bei der FIB-Präparation der Proben muss auf parallele Seitenflächen der TEM-Lamelle geachtet werden. So konnte beobachtet werden, wie Verbiegungen zu Biegekonturen- und Dickenlinien führen, die Kontrast und Intensität in den Hologrammen minimieren, was letztlich die Signalqualität deutlich herabsetzt; solche DF-Hologramme sind teilweise nicht auswertbar. Bewährt hat sich die Präparation von H-bar-Lamellen mit abgestufter Objektdicke oder Lift-out-Lamellen auf die optimale Objektdicke von ca. 120 nm. Dabei wird strikt darauf geachtet, Curtaining zu vermeiden, weil es als Deformation missinterpretiert werden kann. Eine nachträgliche Korrektur mittels eines Nullstrahlhologramms ist theoretisch möglich, hat jedoch experimentell nur eingeschränkt funktioniert; Curtainingartefakte konnten zwar gedämpft, aber nicht vollständig entfernt werden.

Instrumentelle oder methodisch bedingte Artefakte lassen sich durch Aufbereiten der DF-Hologramme vor der Rekonstruktion vermeiden. Sinnvoll ist die Korrektur fehlerhafter Pixel der CCD-Kamera und die Filterung der Fresnelschen Beugungssäume des Biprismas, da sie zu zusätzlichen Gradienten in der rekonstruierten geometrischen Phase führen, welche die durch die Deformationen hervorgerufenen Gradienten, also das eigentliche Signal, überlagern. Die Korrektur fehlerhafter Pixel spielt jedoch gegenüber dem generellen intensitätsbedingten Problem der Signalauflösung in der DFH eine eher untergeordnete Rolle. Die Filterung der Fresnelschen Beugungssäume hat sich bei schmalen Interferenzfeldern um 200 nm als wichtig erwiesen. Bei breiten Interferenzfeldern um 800 nm ist das Zentrum des Interferenzfeldes hingegen frei von den Fresnelschen Beugungssäumen. Angebracht erscheint die Korrektur der Projektiv- und Kameraverzeichnungen, auch wenn die Verzeichnungen in den meisten Fällen weniger als 1 CCD-Pixel betragen, also mindestens eine Größenordnung kleiner sind als die zu messenden Deformationen. Untersucht wurde die Verzeichnungskorrektur mittels Leerhologramm und zuvor erstellter Verzeichnungskarte. Diese wird aus zwei senkrecht zueinander ausgerichteten Leerhologrammserien bestimmt und gibt die Verzeichnungen der CCD-Pixel gegenüber dem unverzeichneten kartesischen Grid an. Der Vergleich der Methoden zeigt keine Unterschiede in den abgeleiteten Deformationskarten. Es reicht also aus eine Korrektur, mittels eines einzigen Leerhologramms durchzuführen, obwohl sich mit diesem nur die Verzeichnungen senkrecht zum Interferenzfeld korrigieren lassen.

Die Rekonstruktion des Seitenbandes aus dem DF-Hologramm erfolgt mit einem sinc-Filter. Es bringt gegenüber dem klassischen Butterworth-Filter zwar keine Verbesserungen hinsichtlich der Signalauflösung, allerdings produziert das sinc-Filter eine kleinere Delokalisierung, was sich bei Bildung der Ableitung der Deformationskarte aus benachbarten Pixeln als Vorteil erwiesen hat. Nach der Rekonstruktion verschlechtert die numerische Ableitung der Deformationskarte aus der Phasenverteilung das Signal-Rausch-Verhältnis. Durch geschickte Wahl des Ableitungskernels lässt sich das Rauschverhalten optimieren; das geringste Rauschen in der Deformationskarte tritt auf, wenn die Ableitung im zentralen Pixel als symmetrische Differenz der beiden benachbarten Pixel berechnet wird. Die Hoffnung, durch größere Ableitungskernel eine Mittlung und somit eine Glättung des verrauschten

Signals zu erhalten, hat sich nicht bestätigt. Zusätzlich reduzieren größere Ableitungskernel auch die Lateralauflösung, wodurch die Bestrebungen nach einer Verbesserung der Lateralauflösung, z.B. durch die geschilderten instrumentellen Anpassungen, unnötigerweise kompensiert werden.

Projektionseffekte

Der Einfluss der Objektkippung stellt einen wichtigen Aspekt bei der Aufnahme von DF-Hologrammen dar. Die Verkippung in den Zweistallfall ist notwendig, um die Intensität und damit die Signalqualität in der Beugungswelle zu erhöhen. Gleichzeitig jedoch verschmieren als Folge der Verkippung auch Kanten an den Grenzflächen der untersuchten Struktur. Solange die Verschmierungen von Kanten kleiner als die Lateralauflösung sind, kann dieser Effekt bei der Auswertung von Deformationsfeldern vernachlässigt werden. Idealerweise sollte also die Verkippung des Objekts nicht über diesen Punkt hinaus erfolgen. Bedeutender ist die Frage der Wirkung der veränderten Projektion auf die Messung des Deformationssignals. Experimentell lässt sich bei verschiedenen starken Verkippungen $2^\circ \dots 6^\circ$ aus der Zonenachse eine nur geringe Abweichung $\Delta\epsilon \lesssim \pm 0,05\%$ zwischen den Deformationsprofilen einer Transistorstruktur beobachten; sie liegen somit im Grenzbereich der Signalauflösung $\sigma_\epsilon = 0,05\% \approx \Delta\epsilon$. Eine Mittlung von Deformationsprofilen bei geringer und größerer Objektkippung erlaubt, die wenn auch geringen Einflüsse der Verkippung im Messergebnis zu berücksichtigen.

Schwieriger zu erfassen sind die Einflüsse von Relaxationen an Grenz- und Oberflächen. Denn abhängig von Objektdicke, sowie Ausdehnung und konkreten Verlauf des Relaxationsfeldes in Projektionsrichtung, übertragen sich die Einflüsse von Relaxationen in komplexer Weise in das projizierte Deformationssignal, so dass sie sich nur schwer bis gar nicht vorhersagen lassen; das gemessene Signal kann größer oder kleiner als die tatsächliche im Kristall vorhandene Deformationsfeld sein. Hier helfen nur Vergleiche der Experimente mit Finite-Elemente-Simulationen des tatsächlichen Deformationszustands. Die beobachteten Abweichungen zwischen Simulation und Experiment betragen in der Regel nicht mehr als 10%. Tatsächlich wurde bei Untersuchung realer Transistorstrukturen eine nahezu perfekte Übereinstimmung zwischen Experiment und Simulation des Bulkzustands festgestellt.

Die DFH erlaubt bisher, einzig die Komponenten des Deformationsfeldes in der Projektionsebene unter der wichtigen Nebenbedingung zu bestimmen, dass in Projektionsrichtung keine starken Änderungen des Deformationsfeldes auftreten. Diese Voraussetzung ist für planar strukturierte Halbleiterbauelemente abgesehen von präparationsbedingten Oberflächenrelaxationen erfüllt. Möchte man den Spannungszustand im Halbleiterbauelement vollständig bestimmen, so benötigt man auch die Komponente des Deformationsfeldes in Projektionsrichtung. Eine Möglichkeit, an diese Komponente zu gelangen, wäre, den Kristall so um 90° zu drehen, dass anschließend die vormalige Projektionsrichtung in der Ebene senkrecht zur neuen Projektionsrichtung liegt. Dazu müsste die Probenpräparation angepasst werden; z.B. könnte anstatt einer Lamelle ein einzelner Transistor in der Mitte einer rechteckigen Nadel herauspräpariert werden. Diese Überlegungen könnten den ersten Schritt darstellen, Zugang zur Information über das vollständige dreidimensionale Verspannungsfeld im Transistorkanal zu erhalten. Ultimatives Ziel wäre, die DFH mit der Elektronenholographischen Tomographie zu kombinieren, um das Verspannungsfeld im Transistorkanal tomographisch rekonstruieren zu können. Jedoch sind hierzu noch entscheidende theoretische und experimentelle Fragen zu beantworten, wie die Frage nach der Gültigkeit der Projektionsbedingung unter dem komplizierten Einfluss

in Projektionsrichtung veränderlicher Deformationsfelder auf das in der Projektionsebene aufgezeichnete Deformationssignal sowie die Frage nach der experimentellen Realisierung einer tomographischen Kippserie unter Dunkelfeldabbildung in Zweistrahlbedingung.

Anwendung an aktuellen und zukünftigen Transistorstrukturen

Die Anwendbarkeit der DFH zur Messung der Deformationsfelder im Transistorkanal konnte an aktuellen Halbleiterstrukturen erfolgreich demonstriert werden. Die DFH eignet sich uneingeschränkt zur Vermessung verspannter SiGe-Schichten, sowie mit SiGe an Source und Drain verspannter Transistoren auf Bulk-Si. Die Messergebnisse stehen in Einklang mit analytischen Modellen sowie komplementären Methoden wie der Nanobeugung.

Auch die Deformationsfelder in mit speziellen Deckschichten verspannten Transistoren auf Bulk-Si konnten erfolgreich mittels DFH charakterisiert werden. Insbesondere an tensil verspannten Transistoren wurden mit Finite-Elemente-Simulationen übereinstimmende Resultate erzielt. Dagegen konnte in Transistoren mit kompressiven Deckschichten bisher nur nachgewiesen werden, dass keine Verspannung im Kanal vorliegt. Da dies systematisch bei verschiedenen Strukturen auftritt, ist davon auszugehen, dass es sich hier um die tatsächliche Materialeigenschaft handelt. Denkbar wäre, dass die durch die Deckschicht eingebrachte kompressive Verspannung während der weiteren Prozessierung der Struktur relaxiert. Diese These ließe sich letztlich nur bestätigen, wenn der Deformationszustand in der Transistorstruktur nach einzelnen Prozessschritten systematisch untersucht würde. Diese aufwendige und umfangreiche Untersuchung könnte Teil zukünftiger Arbeiten sein. Ein negativer Einfluss der FIB-Präparation auf die kompressiven Deckschichten kann dagegen nahezu ausgeschlossen werden, da sich die Ergebnisse trotz verschiedener Präparationsstrategien (Rückseitenpräparation, Polieren mit 5 kV-Ionen) reproduzieren lassen.

Schwierig ist die Interpretation der Messergebnisse bei Transistoren, die mittels SiGe an Source-/Drain auf Silicon-on-Insulator (SOI) verspannt werden, da die als Miscut bezeichnete Fehlorientierung zwischen SOI- und Referenzkristall mittels DFH als Rotation von ca. $0,5^\circ$ nachgewiesen werden konnte. Sie gilt als Ursache dafür, dass an der SOI-Unterkante zwischen den Transistoren vermeintlich tensil verspannte Bereiche gemessen werden, die laut Simulation und Vergleich mit Nanobeugung nicht existieren. Diese Art von Strukturen stellt somit die einzige dar, bei denen die DFH nur eingeschränkt anwendbar ist.

Aufgrund der überragenden Signal- und Lateralauflösung erlaubt die DFH auch kleinste Deformationen ($\epsilon = 0,1 \dots 0,3\%$) mit der benötigten Genauigkeit und Zuverlässigkeit zu messen. Somit stellt sie eine der besten Methoden zur Analyse von Deformationsverteilungen in aktuellen und zukünftigen Halbleiterbauelementen dar. Ihre große Stärke liegt darin, die Deformationsverteilung quantitativ als zweidimensionale Deformationskarte zu erfassen, wodurch sie äquivalenten Methoden wie Nanobeugung (NBD) oder konvergenter Elektronenbeugung (CBED), welche Rastermethoden sind, überlegen ist. Allerdings handelt es sich bei der DFH um ein anspruchsvolleres Experiment, das ein TEM mit Biprisma und Feldemissionsquelle, sowie eine stabile Laborumgebung benötigt.

Literaturverzeichnis

- ABRAMOWITZ, M. und I.A. STEGUN: *Handbook of Mathematical Functions: With Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*. Applied mathematics series. Dover Publications (1964).
- ALEXANDRE, L., G. JURCZAK, C. ALFONSO, W. SAIKALY, C. GROSJEAN, A. CHARAL und J. THIBAUT: *Microscopy of Semiconducting Materials 2007: Proceedings of the 15th Conference, 2-5 April 2007, Cambridge, UK*, Kap. CBED and FE Study of Thin Foil Relaxation in Cross-Section Samples of Si/Si_{1-x}Ge_x and Si/Si_{1-x}Ge_x/Si Heterostructures, S. 415–418. Springer London, Limited (2008).
- AMELINCKX, S., D. VAN DYCK, J. VAN LANDUYT und G. VAN TENDELOO: *Electron Microscopy: Principles and Fundamentals*. Wiley (2008).
- ANG, KAH-WEE, KING-JIEN CHUI, V. BLIZNETSOV, ANYAN DU, N. BALASUBRAMANIAN, MING-FU LI, G. SAMUDRA und YEE-CHIA YEO: Enhanced performance in 50 nm N-MOSFETs with silicon-carbon source/drain regions. In *Electron Devices Meeting, 2004. IEDM Technical Digest. IEEE International*, S. 1069–1071 (2004).
- ARMIGLIATO, A., R. BALBONI und S. FRABBONI: Improving spatial resolution of convergent beam electron diffraction strain mapping in silicon microstructures. *Applied Physics Letters* **86**(6), S. 063508 (2005).
- ASHCROFT, N.W. und N.D. MERMIN: *Solid state physics*. W. B. Saunders, Philadelphia (1976).
- BARDEEN, J. und W. SHOCKLEY: Deformation Potentials and Mobilities in Non-Polar Crystals. *Phys. Rev.* **80**, S. 72–80. (1950).
- BÉCHÉ, A., L. CLÉMENT und J.L. ROUVIÈRE: Improved accuracy in nano beam electron diffraction. *Journal of Physics: Conference Series* **209**(1), S. 012063 (2010).
- BÉCHÉ, A., J.L. ROUVIÈRE, J.P. BARNES und D. COOPER: Dark field electron holography for strain measurement. *Ultramicroscopy* **111**(3), S. 227–238 (2011).
- BÉCHÉ, A., J.L. ROUVIÈRE, J.P. BARNES und D. COOPER: Strain measurement at the nanoscale: Comparison between convergent beam electron diffraction, nano-beam electron diffraction, high resolution imaging and dark field electron holography. *Ultramicroscopy* **131**(0), S. 10–23 (2013).
- BÉCHÉ, A., J.L. ROUVIÈRE, L. CLEMENT und J.M. HARTMANN: Improved precision in strain measurement using nanobeam electron diffraction. *Applied Physics Letters* **95**(12), S. 123114 (2009).
- BERRY, M. V.: Quantal Phase Factors Accompanying Adiabatic Changes. *Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences* **392**(1802), S. 45–57 (1984).
- BRAGG, W.L.: The Diffraction of Short Electromagnetic Waves by a Crystal. *Proc. Cambridge Phil. Soc.* **17**, S. 43–57 (1913).

- BUSCH, H.: Calculation of the Path of an Electron Beam in an Axial Symmetrical Electromagnetic Field. *Annalen der Physik* **81**, S. 974 (1926).
- CELLER, G.K. und S. CRISTOLOVEANU: Frontiers of silicon-on-insulator. *Journal of Applied Physics* **93**(9), S. 4955–4978 (2003).
- CHAMPENEY, D.C.: *Fourier transforms and their physical applications*. Techniques of physics. Academic Press (1973).
- CHEN, X., S. FANG, W. GAO, T. DYER, Y.W. TEH, S.S. TAN, Y. KO, C. BAIOTTO, A. AJMERA, J. PARK, J. KIM, R. STIERSTORFER, D. CHIDAMBARRAO, Z. LUO, N. NIVO, P. NGUYEN, J. YUAN, S. PANDA, O. KWON, N. EDLEMAN, T. TJOA, J. WIDODO, M. BELYANSKY, M. SHERONY, R. AMOS, H. NG, M. HIERLEMAN, D. COOLBOUGH, A. STEEGEN, I. YANG, J. SUDIJONO, T. SCHIML, J.H. KU und C. DAVIS: Stress Proximity Technique for Performance Improvement with Dual Stress Liner at 45nm Technology and Beyond. In *VLSI Technology, 2006. Digest of Technical Papers. 2006 Symposium on*, S. 60–61 (2006).
- CHU, MIN, YONGKE SUN, UMAMAHESWARI AGHORAM und SCOTT E. THOMPSON: Strain: A Solution for Higher Carrier Mobility in Nanoscale MOSFETs. *Annual Review of Materials Research* **39**(1), S. 203–229 (2009).
- CHUI, KING-JIEN, KAH-WEE ANG, N. BALASUBRAMANIAN, MING-FU LI, G.S. SAMUDRA und YEE-CHIA YEO: n-MOSFET With Silicon-Carbon Source/Drain for Enhancement of Carrier Transport. *Electron Devices, IEEE Transactions on* **54**(2), S. 249–256 (2007).
- CLAVERIE, A.: *Transmission Electron Microscopy in Micro-nanoelectronics*. ISTE. Wiley (2013).
- COOPER, D., A. BÉCHÉ, J.M. HARTMANN, L. HUTIN, C. LE ROYER und J.L. ROUVIÈRE: Strain measurement for the semiconductor industry with nm-scale resolution by dark field electron holography and nanobeam electron diffraction. *Journal of Physics: Conference Series* **326**(1), S. 012025 (2011).
- COOPER, DAVID, JEAN-PAUL BARNES, JEAN-MICHEL HARTMANN, ARMAND BÉCHÉ und JEAN-LUC ROUVIÈRE: Dark field electron holography for quantitative strain measurements with nanometer-scale spatial resolution. *Applied Physics Letters* **95**(5), S. 053501 (2009).
- COOPER, DAVID, ARMAND BÉCHÉ, JEAN-MICHEL HARTMANN, VERONIQUE CARRON und JEAN-LUC ROUVIÈRE: Strain evolution during the silicidation of nanometer-scale SiGe semiconductor devices studied by dark field electron holography. *Applied Physics Letters* **96**(11), S. 113508 (2010a).
- COOPER, DAVID, ARMAND BÉCHÉ, JEAN-MICHEL HARTMANN, VERONIQUE CARRON und JEAN-LUC ROUVIÈRE: Strain mapping for the semiconductor industry by dark-field electron holography and nanobeam electron diffraction with nm resolution. *Semiconductor Science and Technology* **25**(9), S. 095012 (2010b).
- COOPER, DAVID, CYRILLE LE ROYER, ARMAND BÉCHÉ und JEAN-LUC ROUVIÈRE: Strain mapping for the silicon-on-insulator generation of semiconductor devices by high-angle annular dark field scanning electron transmission microscopy. *Applied Physics Letters* **100**(23), S. 233121 (2012).
- CRESSLER, J.D.: *Silicon Heterostructure Handbook: Materials, Fabrication, Devices, Circuits and Applications of SiGe and Si Strained-Layer Epitaxy*. Taylor & Francis (2005).

- DE GRAEF, M.: *Introduction to Conventional Transmission Electron Microscopy*. Cambridge University Press (2003).
- DENNEULIN, T., D. COOPER und J.L. ROUVIÈRE: Practical aspects of strain measurement in thin SiGe layers by (004) dark-field electron holography in Lorentz mode. *Micron* **62**(0), S. 52 – 65 (2014).
- DISMUKES, J.P., L. EKSTROM und R.J. PAFF: Lattice Parameter and Density in Germanium-Silicon Alloys¹. *The Journal of Physical Chemistry* **68**(10), S. 3021–3027 (1964).
- ENGELMANN, HANS-JUERGEN, STEFAN HEINEMANN und EHRENFRIED ZSCHECH: Evaluation of TEM Techniques for Local Strain Measurements in the Transistor Channel Region of SOI CMOS Devices. In *Proceedings of the 16th International Congress for Electron Microscopy ICEM16, Sapporo*, Bd. 3, S. 990 (2006).
- FLYNN, THOMAS J.: Two-dimensional phase unwrapping with minimum weighted discontinuity. *J. Opt. Soc. Am. A* **14**(10), S. 2692 – 2701 (1997).
- FORMÁNEK, PETR: *TEM-Holographie an Bauelementestrukturen der Mikroelektronik*. Dissertation, Brandenburgischen Technischen Universität Cottbus (2005).
- FOURNEL, FRANK, HUBERT MORICEAU, BERNARD ASPAR, KARINE ROUSSEAU, JOËL EYMERY, JEAN-LUC ROUVIÈRE und NOËL MAGNEA: Accurate control of the misorientation angles in direct wafer bonding. *Applied Physics Letters* **80**(5), S. 793–795 (2002).
- GHANI, T., M. ARMSTRONG, C. AUTH, M. BOST, P. CHARVAT, G. GLASS, T. HOFFMANN, K. JOHNSON, C. KENYON, J. KLAUS, B. MCINTYRE, K. MISTRY, A. MURTHY, J. SANDFORD, M. SILBERSTEIN, S. SIVAKUMAR, P. SMITH, K. ZAWADZKI, S. THOMPSON und M. BOHR: A 90nm high volume manufacturing logic technology featuring novel 45nm gate length strained silicon CMOS transistors. In *Electron Devices Meeting, 2003. IEDM '03 Technical Digest. IEEE International*, S. 11.6.1–11.6.3 (2003).
- GOLDSTEIN, R., H. ZEBKER und C. WERNER.: Satellite radar interferometry: Two-dimensional phase unwrapping. *Radio Science* **23**, S. 713–720 (1988).
- HANSZEN, K.-J.: Method of off-axis electron holography and investigations of the phase structure in crystals. *Journal of Physics D: Applied Physics* **19**(3), S. 373 (1986).
- HANSZEN, K.-J., R. LAUER und G. ADE: Elektronenmikroskopische Holographie. *PTB-Bericht APh* **16**(Physikalisch-Technische Bundesanstalt Braunschweig) (1981).
- HERRING, CONYERS und ERICH VOGT: Transport and Deformation-Potential Theory for Many-Valley Semiconductors with Anisotropic Scattering. *Phys. Rev.* **101**, S. 944–961 (1956).
- HOUELIER, FLORENT: Private Unterredung, Holography Workshop, Toulouse (2011).
- HOWIE, A. und M.J. WHELAN: Diffraction Contrast of Electron Microscope Images of Crystal Lattice Defects. II. The Development of a Dynamical Theory. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences* **263**(1313), S. 217–237 (1961).
- HÜE, FLORIAN, MARTIN HÛTCH, FLORENT HOUELIER, ETIENNE SNOECK und ALAIN CLAVERIE: Strain mapping in MOSFETS by high-resolution electron microscopy and electron holography. *Materials Science and Engineering: B* **154 - 155**(0), S. 221 – 224 (2008).

- HÛTCH, MARTIN, CHRISTOPHE GATEL, FLORENT HOUELLIER, ETIENNE SNOECK und KAZUO ISHIZUKA: Darkfield electron holography for strain mapping at the nanoscale. *Microscopy and Analysis* **26**(7), S. 6–10 (2012a).
- HÛTCH, MARTIN, FLORENT HOUELLIER, FLORIAN HÛE und ETIENNE SNOECK: Nanoscale holographic interferometry for strain measurements in electronic devices. *Nature* **453**(7198), S. 1086–1089 (2008).
- HÛTCH, M.J., F. HOUELLIER, C. GATEL, M. LEGROS, Y. TANIGUCHI und E. SNOECK: Optimising (dark-field) electron holography through instrumentation. In *Proceedings of the 15th European Microscopy Congress, 16th–21st September 2012, Manchester, United Kingdom*. The Royal Microscopical Society (2012b).
- HÛTCH, M.J. und T. PLAMANN: Imaging conditions for reliable measurement of displacement and strain in high-resolution electron microscopy. *Ultramicroscopy* **87**(4), S. 199 – 212 (2001).
- HÛTCH, M.J., E. SNOECK und R. KILAAS: Quantitative measurement of displacement and strain fields from HREM micrographs. *Ultramicroscopy* **74**(3), S. 131 – 146 (1998).
- ITO, S., H. NAMBA, K. YAMAGUCHI, T. HIRATA, K. ANDO, S. KOYAMA, S. KUROKI, N. IKEZAWA, T. SUZUKI, T. SAITOH und T. HORIUCHI: Mechanical stress effect of etch-stop nitride and its impact on deep submicron transistor design. In *Electron Devices Meeting, 2000. IEDM '00. Technical Digest. International*, S. 247–250 (2000).
- ITRS: International Roadmap for Semiconductors (2008). URL <http://www.itrs.net>.
- JAVON, E., A. LUBK, R. COURTS, S. REBOH, N. CHERKASHIN, F. HOUELLIER, C. GATEL und M.J. HÛTCH: Dynamical effects in strain measurements by dark-field electron holography. *Ultramicroscopy* **147**(0), S. 70 – 85 (2014).
- KITTEL, C.: *Introduction to solid state physics*. John Wiley & Sons (1971).
- KNOLL, M. und E. RUSKA: Das Elektronenmikroskop. *Zeitschrift für Physik* **78**, S. 318–339 (1932).
- KOCH, CHRISTOPH T., V. BURAK OZDOL und PETER A. VAN AKEN: An efficient, simple, and precise way to map strain with nanometer resolution in semiconductor devices. *Applied Physics Letters* **96**(9), S. 091901 (2010).
- LANDAU, L.D. und E.M. LIFSHITZ: *Elastizitätstheorie*, Bd. 7 von *Lehrbuch der Theoretischen Physik*. Akademie Verlag Berlin, 5. Aufl. (1983).
- LEHMANN, MICHAEL: *F-Praktikum für Physiker, Versuch EH: Elektronenholographie*. Technische Universität Dresden, Speziallabor Triebenbergl, Zum Triebenbergl 50, 01328 Dresden (2003).
- LEHMANN, MICHAEL und HANNES LICHT: Tutorial on Off-Axis Electron Holography. *Microscopy and Microanalysis* **8**, S. 447–466 (2002).
- LENK, ANDREAS: *Holographie von FIB-präparierten Halbleiterteilern*. Dissertation, Technische Universität Dresden (2008).
- LENZ, FRIEDRICH: Statistics of phase and contrast determination in electron holograms. *Optik* **1**, S. 13–14 (1988).
- LEVINSHTEN, M., S. RUMYANTSEV und M. SHUR: *Handbook Series on Semiconductor Parameters*, Bd. 1, 2. World Scientific, London (1999).

- LICHTE, HANNES: Electron holography: optimum position of the biprism in the electron microscope. *Ultramicroscopy* **64**, S. 79–86 (1996).
- LINCK, MARTIN: *Off-axis Holographie im aberrationskorrigierten Transmissionselektronenmikroskop*. Dissertation, Technische Universität Dresden (2010).
- LINCK, MARTIN, JAN SICKMANN, PETER HARTEL und HEIKO MÜLLER: New possibilities for off-axis electron holography by hardware aberration correctors. In *Microscopy and Microanalysis*, 16 (Suppl. 2), S. 94–95 (2010).
- LUBK, AXEL: *Quantitative off-axis Electron Holography and (multi-) ferroic interfaces*. Dissertation, Technische Universität Dresden (2010).
- LUBK, AXEL, ELSA JAVON, NIKOLAY CHERKASHIN, SHAY REBOH, CHRISTOPHE GATEL und MARTIN HÛTCH: Dynamic scattering theory for dark-field electron holography of 3D strain fields. *Ultramicroscopy* **136**(0), S. 42 – 49 (2014).
- MARKS, L.D.: Wiener-filter enhancement of noisy HREM images. *Ultramicroscopy* **62**, S. 43–52 (1996).
- MATTHEWS, J.W. und A.E. BLAKESLEE: Defects in epitaxial multilayers: III. Preparation of almost perfect multilayers. *Journal of Crystal Growth* **32**(2), S. 265 – 273 (1976).
- MÖLLENSTEDT, G. und H. DÜKER: Beobachtungen und Messungen an Biprisma-Interferenzen mit Elektronenwellen. *Zeitschrift für Physik* **145**, S. 377–397 (1956).
- MÖLLENSTEDT, G. und M. KELLER: Elektroneninterferometrische Messung des inneren Potentials. *Zeitschrift für Physik* **148**, S. 34–37 (1957).
- MÖLLENSTEDT, G. und H. WAHL: Elektronenholographie und Rekonstruktion mit Laserlicht. *Naturwissenschaften* **55**, S. 340–341 (1968).
- PIDIN, S., T. MORI, R. NAKAMURA, T. SAIKI, R. TANABE, S. SATOH, M. KASE, K. HASHIMOTO und T. SUGII: MOSFET current drive optimization using silicon nitride capping layer for 65-nm technology node. In *VLSI Technology, 2004. Digest of Technical Papers. 2004 Symposium on*, S. 54–55 (2004).
- PONCHET, ANNE, CHRISTOPHE GATEL, CHRISTIAN ROUCAU und MARIE-JOSÉ CASANOVE: *Mechanical Stress on the Nanoscale: Simulation, Material Systems and Characterization Techniques*, Kap. Strain Analysis in Transmission Electron Microscopy: How far can we go? Wiley (2011).
- RÖDER, FALK: *Off-axis Elektronenholographie elastisch und inelastisch gestreuter Elektronen*. Dissertation, Technische Universität Dresden (2013).
- RUSKA, E. und M. KNOLL: Die magnetische Sammelspule für schnelle Elektronenstrahlen. *Zeitschrift für technische Physik* **12**, S. 389–400, 448 (1931).
- RUSS, JOHN: *The Image Processing Handbook*. CRC Press, Boca Raton (2007).
- SICKMANN, JAN, PETR FORMÁNEK, MARTIN LINCK, UWE MUEHLE und HANNES LICHTE: Imaging modes for potential mapping in semiconductor devices by electron holography with improved lateral resolution. *Ultramicroscopy* **111**(4), S. 290 – 302 (2011).

- SICKMANN, JAN, MARTIN LINCK, PETER HARTEL und HEIKO MÜLLER: New Possibilities for Off-axis Electron Holography by Hardware Aberration Correction. In *Proceedings of the 17th International Microscopy Congress, Rio de Janeiro, Brazil* (2010).
- SMITH, CHARLES S.: Piezoresistance Effect in Germanium and Silicon. *Phys. Rev.* **94**, S. 42–49 (1954).
- SNOECK, ETIENNE, PETER HARTEL, MAX HAIDER und PETER C. TIEMEIJER: Using a CEOS-objective lens corrector as a pseudo Lorentz lens in a Tecnai F20 TEM. In *Proceedings of the IMC16 International Microscopy Congress, Sapporo*, Bd. 2, S. 730 (2006).
- SZE, S.M.: *Semiconductor Devices: Physics and Technology*. John Wiley & Sons Singapore Pte. Limited (2013).
- SZE, S.M. und K.K. NG: *Physics of Semiconductor Devices*. Wiley-Interscience publication. John Wiley & Sons (2006).
- THOMPSON, S., N. ANAND, M. ARMSTRONG, C. AUTH, B. ARCOT, M. ALAVI, P. BAI, J. BIELEFELD, R. BIGWOOD, J. BRANDENBURG, M. BUEHLER, S. CEA, V. CHIKARMANE, C. CHOI, R. FRANKOVIC, T. GHANI, G. GLASS, W. HAN, T. HOFFMANN, M. HUSSEIN, P. JACOB, A. JAIN, C. JAN, S. JOSHI, C. KENYON, J. KLAUS, S. KLOPCIC, J. LUCE, Z. MA, B. MCINTYRE, K. MISTRY, A. MURTHY, P. NGUYEN, H. PEARSON, T. SANDFORD, R. SCHWEINFURTH, R. SHAHEED, S. SIVAKUMAR, M. TAYLOR, B. TUFTS, C. WALLACE, P. WANG, C. WEBER und M. BOHR: A 90 nm logic technology featuring 50 nm strained silicon channel transistors, 7 layers of Cu interconnects, low k ILD, and 1 /spl mu/m/sup 2/ SRAM cell. In *Electron Devices Meeting, 2002. IEDM '02. International*, S. 61–64 (2002).
- THOMPSON, S.E., M. ARMSTRONG, C. AUTH, M. ALAVI, M. BUEHLER, R. CHAU, S. CEA, T. GHANI, G. GLASS, T. HOFFMAN, CHIA-HONG JAN, C. KENYON, J. KLAUS, K. KUHN, ZHIYONG MA, B. MCINTYRE, K. MISTRY, A. MURTHY, B. OBRADOVIC, R. NAGISETTY, PHI NGUYEN, S. SIVAKUMAR, R. SHAHEED, L. SHIFREN, B. TUFTS, S. TYAGI, M. BOHR und Y. EL-MANSY: A 90-nm logic technology featuring strained-silicon. *Electron Devices, IEEE Transactions on* **51**(11), S. 1790–1797 (2004).
- TREACY, M.M.J. und J.M. GIBSON: The effects of elastic relaxation on transmission electron microscopy studies of thinned composition-modulated materials. *Journal of Vacuum Science & Technology B: Microelectronics and Nanometer Structures* **4**(6), S. 1458–1466 (1986).
- TREACY, M.M.J., J.M. GIBSON und A. HOWIE: On elastic relaxation and long wavelength microstructures in spinodally decomposed In_xGa_{1-x}As_yP_{1-y} epitaxial layers. *Philosophical Magazine A* **51**(3), S. 389–417 (1985).
- USUDA, KOJI, TOSHINORI NUMATA, TOSHIFUMI IRISAWA, NORIO HIRASHITA und SHINICHI TAKAGI: Strain characterization in {SOI} and strained-Si on {SGOI} {MOSFET} channel using nano-beam electron diffraction (NBD). *Materials Science and Engineering: B* **124–125**(0), S. 143 – 147 (2005). {EMRS} 2005, Symposium D Materials Science and Device Issues for Future Technologies.
- V. BORRIES, B. und E. RUSKA: Die Abbildung durchstrahlter Folien im Elektronenmikroskop. *Zeitschrift für Physik* **83**, S. 187–193 (1933).
- WAHL, H.: *Bildebenenholografie mit Elektronen*. Habilitationsschrift, Universität Tübingen (1975).

- WIENER, NORBERT: *Extrapolation, Interpolation, and Smoothing of Stationary Time Series*. Wiley, New York (1949).
- WOLF, DANIEL: *Elektronen-Holographische Tomographie zur 3D-Abbildung von elektrostatischen Potentialen in Nanostrukturen*. Dissertation, TU Dresden (2010).
- ZAUMSEIL, P.: A fast X-ray method to determine Ge content and relaxation of partly relaxed Si_{1-x}Ge_x layers on silicon substrates. *physica status solidi (a)* **141**(1), S. 155–161 (1994).
- ZHU, J., Y. K. ZHOU, S. L. TOH, Z. H. MAI, J. LAM, A. Y. DU, Y. N. HUA und R. RAJGOPAL: TEM dark-field off-axis electron holography strain measurement on embedded-SiGe pMOSFETs and comparison with nano-beam diffraction strain measurement. In *Physical and Failure Analysis of Integrated Circuits (IPFA), 2012 19th IEEE International Symposium on the*, S. 1–5 (2012).

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich all jenen Menschen meinen Dank aussprechen, die auf unterschiedliche Weise zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben. Zu besonderem Dank verpflichtet bin ich Prof. Dr. Hannes Lichte, der sich bereit erklärt hat, die wissenschaftliche Betreuung dieser Doktorarbeit zu übernehmen. Ohne seine Hilfe, seine konstruktiven Anregungen und die vielen Diskussionen hätte diese Arbeit nicht entstehen können. In meiner Zeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter des Speziallabors Triebenberglabors am Institut für Strukturphysik der Technischen Universität Dresden habe ich besonders die hervorragende Arbeitsumgebung schätzen gelernt. Die gute Laborausstattung und das kreative Arbeitsklima haben beträchtlich zum Erfolg meiner Arbeit beigetragen.

Darüber hinaus bedanke ich mich herzlich bei den derzeitigen und ehemaligen Mitarbeitern des Triebenberglabors für die erfolgreiche Zusammenarbeit. Danken möchte ich Dr. Martin Linck (inzw. CEOS Heidelberg) und Dr. Dorin Geiger (inzw. Universität Ulm), die mich mit der Bedienung des Tecnai F20 TEM und den Grundzüge der Aberrationskorrektur vertraut gemacht haben. Dr. Daniel Wolf danke ich für die von ihm entwickelten und zur Verfügung gestellten DigitalMicrograph-Skripte sowie seine Hilfestellung bei der Programmierung. Großer Dank gilt auch Dr. Axel Lubk für seine Diskussionen zu den theoretischen Hintergründen der Dunkelfeldholographie. Daneben danke ich auch Dr. Falk Röder, mich seinen Diskussionen und Anregungen unterstützt zu haben. Bei Dipl.-Ing. Bernd Einenkel möchte ich mich für die konstruktiven Unterstützung bei allen technischen Problemen am TEM bedanken. Dr. Felix Börrnert danke ich für viele hilfreiche Tipps zur Formatierung dieser Arbeit in Latex. Darüber hinaus bedanke ich mich für die gute Zusammenarbeit und das freundliche Miteinander bei Jonas Krehl, Dr. Andreas Lenk, Heide Müller, Marianne Reibold, Dr. John W. Sandino (inzw. Universidad Bogotá), Sebastian Sturm und Dr. Karin Vogel.

Weiteren Dank verdienen auch meine Projektpartner: Besonderer Dank gilt Dr. Hans-Jürgen Engelman und dem Center for Complex Analysis bei GLOBALFOUNDRIES für die Unterstützung bei der Probenpräparation. Dr. Holm Geisler danke ich für die vergleichenden Nanobeugungsmessungen und die Diskussionen zu den oft komplexen Spannungsverteilungen in den untersuchten Transistorstrukturen. Besonderer Dank gebührt auch Alexander Würfel, der fast alle Proben für mich präpariert hat. Weiterer Dank geht an Jürgen Beister vom NamLab der TU Dresden, von dem ich ebenfalls interessante Proben erhalten habe. Dr. Peter Hartel von der CEOS GmbH Heidelberg danke ich für einige sehr hilfreiche Hinweise im Umgang mit dem Bildfehlerkorrektor als Lorentz Linse.

Bei der Europäischen Union und dem Freistaat Sachsen bedanke ich mich für die finanzielle Unterstützung.

Zu guter Letzt gilt mein aufrichtiger Dank vor allem meinen Eltern, die mich stets unterstützt haben.

Die vorliegende Dissertation wurde im Speziallabor Triebenberg für höchstauflösende Elektronenmikroskopie und -holographie des Instituts für Strukturphysik der Technischen Universität Dresden angefertigt. Die wissenschaftliche Betreuung dieser Dissertation unterlag Prof. Dr. rer. nat. habil. Hannes Lichte, Lehrstuhlinhaber für physikalische Messtechnik an der Technischen Universität Dresden. Das ist mein erstes Promotionsverfahren.

Versicherung

Hiermit versichere ich, dass ich die vorliegende Arbeit ohne unzulässige Hilfe Dritter und ohne Benutzung anderer als der angegebenen Hilfsmittel angefertigt habe; die aus fremden Quellen direkt oder indirekt übernommenen Gedanken sind als solche kenntlich gemacht. Die Arbeit wurde bisher weder im Inland noch im Ausland in gleicher oder ähnlicher Form einer anderen Prüfungsbehörde vorgelegt.

Dresden, den _____

Dipl.-Phys. Jan Sickmann

Anerkennung der Promotionsordnung

Hiermit erkläre ich, dass ich die Promotionsordnung der Fakultät Mathematik und Naturwissenschaften der Technischen Universität Dresden in der Fassung vom 23. Februar 2011 vollständig anerkenne.

Dresden, den _____

Dipl.-Phys. Jan Sickmann